Kuramoto-Sivashinsky方程的混沌动力学

董成伟 著

清华大学出版社

Kuramoto-Sivashinsky 方程的混沌动力学

董成伟　著

清华大学出版社
北　京

内 容 简 介

混沌系统的奇怪吸引子是由无数条周期轨道稠密覆盖构成的，周期轨道是非线性动力系统中除不动点外最简单的不变集，它不仅能够体现混沌运动的所有特征，而且和系统振荡的产生与变化密切相关，因此分析复杂系统的动力学行为时获取周期轨道具有重要的意义。本书主要介绍了应用动力系统理论和变分法，探究了时空混沌系统 Kuramoto-Sivashinsky 方程的混沌动力学性质，并详细分析了方程的稳态解，计算出混沌系统相空间起组织作用的重要轨道，如周期轨道和连接轨道。

本书可供从事非线性动力系统应用研究的研究生和本科生阅读，也可为从事非线性物理等相关领域的研究人员提供一定的参考和借鉴。

图书在版编目(CIP)数据

Kuramoto-Sivashinsky 方程的混沌动力学/董成伟著. —北京：清华大学出版社，2018
ISBN 978-7-302-51021-5

Ⅰ. ①K…　Ⅱ. ①董…　Ⅲ. ①非线性方程－常微分方程－混沌理论－动力学
Ⅳ. ①O175.14

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 192055 号

责任编辑：鲁永芳
封面设计：傅瑞学
责任校对：赵丽敏
责任印制：丛怀宇

出版发行：清华大学出版社
网　　址：http://www.tup.com.cn，http://www.wqbook.com
地　　址：北京清华大学学研大厦 A 座　**邮　　编**：100084
社 总 机：010-62770175　**邮　　购**：010-62786544
投稿与读者服务：010-62776969，c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质量反馈：010-62772015，zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 装 者：三河市金元印装有限公司
经　　销：全国新华书店
开　　本：170mm×240mm　**印　　张**：10.5　**字　　数**：164 千字
版　　次：2018 年 9 月第 1 版　**印　　次**：2018 年 9 月第1 次印刷
定　　价：69.00 元

产品编号：079930-01

前　　言

近年来随着人类生产实践和科学研究的不断进步,涌现出了各种非线性、多尺度、复杂体系问题,例如原子分子电离问题、细胞周期调控问题等。此类问题的研究大大促进了非线性动力学的发展和它在各个学科中的应用。早期非线性动力学的研究对象,很多是从工程实践中抽象出来的具有代表性的非线性方程。对它们的深入研究,揭示了分形、分岔以及混沌运动等一系列非线性系统独有的现象,发展出了多种成功的方法及理论来刻画和分析这些系统。

非线性空间延展体系广泛存在于自然界和工程实践中,其动力学演化极其复杂难解,是科学家们长期关注的重要问题。本书将着重介绍利用动力系统理论和变分计算方法,仔细考察经典的描述系统相位变化的 Kuramoto-Sivashinsky(KS)方程,详细分析其稳态解。取得的研究结果使我们对系统的斑图动力学有了更全面的认识,这种分析方法为类似复杂系统的研究提供了有力的新工具。

本书主要包括 4 部分内容。第 1 部分包括第 1～3 章。第 1 章简要介绍了动力系统的发展史。第 2 章介绍了可以应用于时空延展动力系统的周期轨道理论,该理论用周期轨道的展开来计算物理量的平均值。第 3 章详细介绍了一种用来寻找高维流不稳定周期轨道的强有力方法——变分法。并将该方法应用到了交叉电磁场条件下的里德伯原子系统中,通过研究电磁场参数变化时周期轨道的演变,发现核外电子被电离后存在着小概率的电离回归现象。此外还以勒斯勒(Rössler)方程周期轨道的计算为例,说明如何有效建立符号动力学来实现轨道的系统搜寻。

第 2 部分是第 4 章。本章应用变分法研究 KS 方程,以两条最简单的周期轨道作为组成单元,成功建立了一维符号动力学,系统地找到了该方程在弱湍流时一定拓扑长度内的所有短周期轨道。结果表明:轨道拓扑的分类方

式为今后研究如何剖分高维相空间或者流体系统时提供了一种可借鉴的重要方法。

第 3 部分是第 5 章。本章研究了静态 KS 方程的不稳定周期轨道,对所有找到的短周期轨道按照拓扑的方式进行归类。首先阐明了不动点在动力系统中起到的组织作用,然后通过选取静态 KS 方程中的四条基本周期轨道作为组成单元,建立了符号动力学来寻找更长的不稳定周期轨道。此外,研究了这些短周期轨道在选取的一个庞加莱截面上的动力学性质,利用多尺度平均微扰方法分析小积分常数值时,系统相空间不动点和各类轨道的分布情况。最后还进一步研究了动力系统在何时发生各种分岔现象。

第 4 部分包括第 6 章和第 7 章。第 6 章介绍了一种寻找非线性动力系统中连接轨道的理论方法,基于该方法计算了静态 KS 方程对称的螺旋型异宿轨道。第 7 章作了总结以及对将来可能的研究方向进行展望。书中的绝大部分内容是作者近年来研究成果的总结,本书的目的是将这些最新的研究成果作一个初步的总结奉献给读者,希望能够推动对 KS 方程的更进一步深入研究。

作者感谢国家自然科学基金委和中北大学物理学科建设经费的资金支持。作者在从事研究和本书的撰写过程中得到了中北大学物理学科部同事的大力支持和帮助,在此表示衷心的感谢。同时,深深地感谢家人长期以来对我工作的关心、支持和帮助。

鉴于作者水平有限,且成书时间仓促,错误之处在所难免,衷心地欢迎读者批评指正。

董成伟

2018 年 3 月

目　　录

第1章 引　　言

1.1 动力系统概述

早在17世纪人们就开始研究动力系统，牛顿首先发明了微分方程以及万有引力定律，他用平方反比定律成功解决了二体问题。但是，在这之后当科学家们想要用同样的方法解决三体问题的时候，则遇到了困难。19世纪，法国数学家庞加莱对三体问题的研究作出了重要的贡献[1]，他认为在三体问题中，可以把重点放在定性分析上，而不是定量分析。他发展了一套几何方法来处理该问题，而这套方法的影响却远远超出了天体物理学的领域。庞加莱也是第一个发现混沌的人，在一些确定性的系统中，混沌运动可以明显的表现出随机性，动力系统对于初始值有着非常敏感的依赖性。

庞加莱在19世纪末继而提出了“庞加莱截面法”。该方法通过在高维相空间中适当选取一个截面，此截面称为庞加莱截面，要注意这个截面不能与轨道相切，然后在此截面上某一变量取固定值，这样原来相空间的连续轨道在庞加莱截面上便表现为一些离散点之间的映射。庞加莱截面法为研究动力系统的性质提供了一种简单的方式：通过观察系统的运动轨道与该截面的交点，就可以判断运动是周期的、准周期的、还是混沌的。如果除掉初始阶段的暂态过程，只考虑一段时间以后庞加莱截面上的稳定图像，当截面上只有一个点或少数离散点时，则可判定运动是周期的；若截面上是一封闭曲线，可判定运动是准周期的；当截面上是大量的且有一定层次结构的密集点时，可判定系统处于混沌状态。

进入20世纪，随着科学技术的发展，动力系统在数学、物理和工程上有着越来越多的应用，因而得到了广泛的关注。20世纪50年代计算机的发明，对动力系统的研究起到了里程碑式的作用。它使得人们可以在计算机上对一些复杂的非线性方程进行数值模拟，从而获得一些以前根本不可能获得的信

息。1963 年,洛伦兹在研究大气对流现象的一个简单模型时,就是通过数值模拟发现了在一个奇怪吸引子上的混沌现象[2]。他发现模型对应的方程最终既不是平衡的也不是周期的,如果从两个相差很小的初始条件开始模拟,得到的结果却是截然不同的,这暗示此系统是不可预知的。此外洛伦兹还从他的模型中发现了分形现象。另外值得一提的工作是在 60 年代,斯迈尔基于拓扑和几何的方法提出了著名的斯迈尔马蹄[3]。

从那以后,动力系统变成了一个很热的研究领域。它的研究内容已经从常微分方程扩展到了偏微分方程以及微分映射,同时还催生出了一些新的研究方向,例如元胞自动机和晶格场理论[4,5],为模拟包括自组织结构在内的复杂现象提供了强有力的方法。

20 世纪 70 年代是混沌蓬勃发展的年代,1975 年李天岩和约克在一篇题为《周期三则混沌》的论文中正式提出了“混沌”这个概念[6]。当然,这个阶段最令人惊奇的发现还数费根鲍姆发现的从规律行为到混沌行为转变的一种普适性[7]。他的工作把混沌与统计力学中的相变联系在了一起,吸引了一大批物理学家来研究动力系统。与此同时,一些实验科学家也做了相关的实验来检验混沌现象。

除了混沌之外,动力系统还有另外两个发展。一是芒德布罗发展了分形[8],二是温弗里将动力系统中的几何方法应用到了生物学中。参考文献[9]和参考文献[10]总结了前面提到的科学家们早期发表的有关动力系统研究的论文,为我们系统地梳理了动力系统的发展过程。

动力系统经过多年的研究,如今已发展出了分岔、混沌、孤立子等诸多分支,不同的分支之间又是互相联系的。人们在研究动力系统时往往采用不同的手段。采用解析的方式研究微分方程的解通常是很困难的,但是如果一个微分方程能够被转化为有限个代数方程的话,即便代数方程不是精确可解的,问题也差不多可以解决了[11]。线性系统采用直接积分或者级数展开法,是最有效的,人们也发明了多种方法来尝试对非线性方程进行积分。定性分析方法结合了代数、解析和集合法,它是研究微分方程的主要手段。对称性的考虑以及李群理论也引起了越来越多的关注。有趣的是,有时为了解释动力系统的某些性质,微分方程的精确解不一定是最重要的,我们只需要知道与系统相联系的对称群就足够了[12]。解的连续性条件给全局拓扑性带来了

一些限制，可以通过构建一定的拓扑不变集，使相空间的结构大大约化。

对于耗散系统，我们最关心的是集中在相空间小区域内的长期动力学行为。为了理解系统的渐近行为，仅仅需要知道子集，然后在它周围研究动力系统即可[13]。在耗散混沌系统中，复杂的渐近动力学不是发生在流形上而是发生在具有分形结构的紧子集上，我们称之为奇怪不变集。目前已有多种定义分形维数的方法，如盒子维数、关联维数等，我们可以通过最大李雅普诺夫指数看出动力系统的混沌特性。解的统计行为主要依赖于系统的各态历经性质，与此相关的讨论已成为一个研究方向[14]。

在分析问题时多数情况下都是采取数值计算，它已经成为动力系统研究中不可或缺的工具。计算机模拟出来的图像能够带给我们直观的视觉印象，从而增进对动力系统的了解。数值方法也可以用来产生近似的不变流形，它可用来定性讨论系统的长期行为[15]。在混沌系统中，除了不动点之外，最容易找到的就是不稳定的周期轨道了。

1.2　周期轨道概述

人类最早发现动力系统的可观测现象是周期运动，随后发现了准周期运动。混沌运动中包含有无穷多个不稳定的周期轨道，这些轨道对初始条件很敏感。如今，人们相信在一般的动力系统中混沌也是有规则的，并为此开展了许多研究工作。奇怪吸引子通常具有自相似的分形结构，它由许多条不稳定的周期轨道稠密覆盖。如果它是紧的、最大的、双曲型的以及不可分解的，则存在能够把动力系统的每一条不稳定的周期轨道对应成一串符号序列的马尔可夫分割[16]。一般来说，奇怪吸引子存在复杂的结构，需要用无穷多个符号序列来表示这些周期轨道。

当改变参数时，周期轨道的产生或消失就伴随着系统分岔行为的发生。通常有两种方式产生周期轨道，一种方式是局域分岔，例如霍普夫分岔。当不动点的雅可比矩阵的一对复数本征值穿过虚轴的时候就发生了霍普夫分岔，产生的周期轨道继承了不动点的稳定性。另一种方式是全局分岔，例如同宿分岔，它和周期轨道的产生或消失紧密联系。全局的鞍结分岔或者叉式分岔也和一两个周期轨道的产生或消失有关。周期轨道构成了奇怪吸引子

的基本框架[17]，许多物理量如拓扑熵、分形维数、逃逸率等都可以通过本书第 2 章介绍的周期轨道理论计算出来[18]。如果存在符号动力学，轨道展开则随着周期轨道拓扑长度的增加以指数(甚至是超指数)的速度收敛[19]。

不稳定的周期轨道可以为我们更清楚地了解动力系统带来很多信息，有时一些短的周期轨道就足以定性讨论动力系统的性质。如果我们找齐了一定长度的周期轨道，就可以用周期轨道理论来计算物理量的平均值。所以，周期轨道理论应用的关键是如何找齐需要的不稳定周期轨道。对于双曲系统来说，目前已经有多种数值方法可以计算周期轨道[20-22]。如果在相空间中选取合适的庞加莱截面，短的周期轨道可以用牛顿法算出。要想找到更长的周期轨道，那么多点打靶法则要更稳定一些[18,23]。对于高维或者湍流系统来说变分法寻找周期轨道非常有效[24,25]，我们将在本书第 3 章详细介绍该方法。在用数值方法计算周期轨道时，最重要的是建立符号动力学，它为周期轨道的数目提供了一个上限，并且能够帮助我们预测长轨道的位置，理想情况下保证我们不会错过任何短的周期轨道。

时空混沌这个概念就如同动力学术语里的湍流概念一样[26]，目前在数学上还没有普适的定义。时间混沌和空间混沌尽管很相似，但却是两个彼此互相独立的概念。时间混沌存在于低维系统中，例如洛伦兹系统，这一非线性系统的坐标变量被高度简化，动力学行为仅用三维空间坐标来描述。一个时空混沌系统在时域上存在着极其复杂的动力学行为，在空间特性上又呈现出高度的无序性。但这并不意味着系统是总体不规则的，通常来讲，在时间空间延展系统里总是可以发现有规律的元素存在。严格地说，时空混沌只能发生在无穷维系统中，但在数值计算时我们处理的往往是有限维的系统。如果在时间和空间上都呈现出了明显的混沌特性，那么我们就认为该系统是时空混沌的。

克里斯琴森(Christiansen)等在 1997 年提出周期轨道理论可以应用到研究时空混沌系统上[27]，他们以一个最简单的一维非线性偏微分方程——Kuramoto-Sivashinsky 方程 (KS 方程)为例研究了它的不稳定复现斑图和轨道展开等性质。这个工作的新颖之处就在于，嵌入高维空间的动力系统奇怪吸引子可以通过引入内在的曲线坐标近似的约化为一维映射。于是我们接下来便可以借助已有的一维符号动力学的知识，利用多点打靶法在数值上计

算出该系统所有短的周期轨道。但是多点打靶法在计算高维系统的周期轨道时就会面临诸多难题,其中最主要的一点是我们必须对于高维流的拓扑结构有很清楚的了解,这样才能够选择多个合适的庞加莱截面,并且有比较好的初始猜想。通常来讲高维系统的动力学性质是很难想象的,即便精确猜到了周期轨道上一个点的位置,多数的数值算法也很可能不再有效。

2004年兰岳恒教授设计出了一种在高维连续流中寻找周期轨道的新颖算法:变分法。该方法的物理思想是不只猜一条周期轨道上的若干个点,取而代之的是猜整条轨道。通过一个偏微分方程,可以使最初猜想的圈速度和系统中真实的周期轨道速度之间的偏差在时间上趋于无穷时校准,这样猜想的圈就逐渐演变成了周期轨道。在数值算法的实现上,采用五点近似作离散化,对大矩阵的计算采用直接三角分解法和伍德伯里(Woodbury)公式。轨道的初始化可以通过以下的方法完成:首先采用四阶龙格-库塔法对系统进行一段时间的演化,把所有接近闭合的那些轨道片段保存下来,随后对这些轨道作快速傅里叶变换,只保留低频部分,逆快速傅里叶变换到相空间后就会得到光滑的闭合轨道。变分法在KS方程、交叉场里德伯原子、洛伦兹方程等诸多非线性系统中取得了成功的应用,实践证明该方法确实是一种强有力的寻找周期轨道的方法。对于一些以往的数值方法很难找到周期轨道的高维混沌系统,基于变分法则可以系统地摘取出多条周期轨道。

KS方程的稳态解是相空间中最简单的不变集,它可以转化为一个三维的动力系统,也称为静态KS方程。研究这个系统很重要,因为它为分析相空间里轨道的分布情况提供了一个粗糙的框架。根据它们的分布情况和性质,相空间被划分为性质不同的各个部分,每一部分都有其独特的动力学行为,不同的部分之间存在轨道来连接。从常态到混沌行为的开端,在这期间系统经历了一系列的分岔过程,稳态解扮演了很重要的作用。在一定的参数范围内,稳态解和可观测到的动力学行为将会直接相关。当参数大于零时,随着参数取值的变化将产生各种有趣的动力学行为,有界解会变得极端复杂。在这个系统中,逃逸轨道占据了相空间中的绝大部分,这给数值计算带来了很大的困难,即使初始化时很接近于这个不变集,多数的轨道也会逃逸掉,因此利用多点打靶法无法摘取出该系统的不稳定周期轨道,变分法成为有效找齐该系统中的周期轨道的强有力的新工具。

在动力系统的相图里，异宿轨道是连接相空间两个不同的不动点的路径。如果轨道开始和结束的不动点是相同的，那么这条轨道是一条同宿轨道。异宿轨道是相空间里两部分之间能量交换的连接桥梁，所以利用解析或者数值的方法来研究这类连接轨道具有十分重要的物理意义。我们将在研究静态 KS 方程不稳定周期轨道的基础上，进一步探讨它的连接轨道。

第 2 章　周期轨道理论简介

本章将介绍可以应用于时空延展动力系统的周期轨道理论。该理论在低维动力系统中大体上已经发展成熟，但仍在不断完善过程中。这一章的安排如下：2.1 节，引入不变测度的概念并且讨论时间和空间的平均；2.2 节和 2.3 节讨论周期轨道理论的重点——迹公式、谱行列式和动力学 ζ(Zeta)函数；2.4 节介绍应用周期轨道展开计算物理量的平均值；2.5 节，将指出该理论面临的一些难题。文献[18]里更全面地介绍了周期轨道理论。

2.1　时间平均和空间平均

在一个具有混沌性质的动力系统中，态空间的轨道通常是非常复杂的。两个相差无几的初值所产生的轨道，将会随着时间的推移按照指数方式分离，这种对初值的敏感性使得我们想要跟踪单个轨道比较困难。我们能做的是描述这个系统的一些平均的性质，例如逃逸率、扩散系数、广义维数和李雅普诺夫指数等。这里我们在演化算符的框架下来讨论这些平均值，其中的核心思想是不去直接计算可观测量的平均值，而是去算生成泛函的期望值。

2.1.1　测度

测度是描述混沌动力系统的一个基本概念，它是定义在 σ 代数上的一个非负集函数，记为 $\mathrm{d}\mu(x)=\rho(x)\mathrm{d}x$。这里通过粗粒化近似来定义和构造一个有物理意义的测度。首先把态空间剖分成 $\mathcal{M}_0$，$\mathcal{M}_1$，$\mathcal{M}_2$，$\cdots$，接着再进行二次分割，即把 $\mathcal{M}_i$ 再分割成 $\mathcal{M}_{i0}$，$\mathcal{M}_{i1}$，$\mathcal{M}_{i2}$，$\cdots$，以此类推。为了方便起见，我们用序列 $\{1,2,3,\cdots,n,\cdots\}$ 来标记态空间的分割，定义特征函数

$$\chi_i(x)=\begin{cases}1, & x\in\mathcal{M}_i\\0, & x\notin\mathcal{M}_i\end{cases}\tag{2-1}$$

那么

$$\Delta\mu_i = \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}\mu(x)\chi_i(x) = \int_{\mathcal{M}_i} \mathrm{d}\mu(x) = \int_{\mathcal{M}_i} \rho(x)\mathrm{d}x \tag{2-2}$$

函数 $\rho(x)=\rho(x,t)$用来标记态空间中 t 时刻代表点的密度，这个密度可以是任意形式，在混沌体系中通常具有奇异性质。此外，我们还假设该测度是归一化的，即 $\sum_i^{(n)} \Delta\mu_i = 1$。其中$(n)$代表在 n 层分割上对所有子区域 i 求和。无穷小的测度 $\rho(x)\mathrm{d}x$ 可以被当成是 $\Delta\mu_i=|\mathcal{M}_i|\rho(x_i)$，$x_i\in\mathcal{M}_i$的无穷精细分割极限。这里$|\mathcal{M}_i|$是区域$\mathcal{M}_i$的体积，当 $n\to\infty$时，$|\mathcal{M}_i|\to 0$。

接下来介绍不变测度的概念。如果代表点的密度随着时间的演化保持不变，$\rho(x,t)=\rho(x,0)=\rho(x)$，则我们称变换 $f^t(x)$是保测度的，其中 t 表示 t 时刻。用式子来表示就是：

$$\int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}y\delta(x-f^t(y))\rho(y) = \rho(x) \tag{2-3}$$

满足这个方程的 $\rho(x)$或许不是唯一的，例如集中在不动点 $x_q=f^t(x_q)$上的测度 $\mathrm{d}\mu(x)=\delta(x-x_q)\mathrm{d}x$，或是这类测度的线性组合等。从物理的角度，我们关注这样一个测度：时间 $t\to\infty$时，任何光滑的初始测度都趋于这个测度

$$\rho_0(x) = \lim_{t\to\infty}\int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}y\delta(x-f^t(y))\rho(y,0),\quad \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}y\rho(y,0) = 1 \tag{2-4}$$

自然测度就是我们要寻找的。对于连续和分立的情况，它分别被定义成

$$\bar{\rho}_{x_0}(y) = \begin{cases} \lim\limits_{t\to\infty}\dfrac{1}{t}\displaystyle\int_0^t \mathrm{d}\tau\delta(y-f^\tau(x_0)), & \text{连续情况} \\ \lim\limits_{n\to\infty}\dfrac{1}{n}\displaystyle\sum_{k=0}^{n-1}\delta(y-f^k(x_0)), & \text{分立情况} \end{cases} \tag{2-5}$$

x_0 是一个一般的初始点。粗粒化近似通常用来解决狄拉克 δ(Delta)函数所带来的麻烦。我们通过在区域$\mathcal{M}_i$上对式(2-5)进行积分来定义自然测度 $\Delta\bar{\mu}_i=\lim\limits_{t\to\infty}\dfrac{t_i}{t}$，其中 t_i 表示轨道在区域$\mathcal{M}_i$上停留的时间。

不妨设 $\boldsymbol{a}=\boldsymbol{a}(x)$是一个可以反映动力系统性质的可观测量，如速度、位移等，它既可以是一个矢量，也可以是一个张量。可观测量 $\boldsymbol{a}$ 的空间平均为

$$\langle\boldsymbol{a}\rangle_\rho = \frac{1}{|\rho_{\mathcal{M}}|}\int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x\rho(x)\boldsymbol{a}(x) \tag{2-6}$$

式中 $|\rho_{\mathcal{M}}| = \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x\rho(x)$ 表示$\mathcal{M}$的质量。如果 ρ 是自然测度，利用各态历经理论

可以得出结论，式(2-6)就是 $\boldsymbol{a}$ 的期望值。将自然测度式(2-5)代入到式(2-6)，可以得到

$$\overline{\boldsymbol{a}_{x_0}} = \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\int_0^t \mathrm{d}\tau\boldsymbol{a}(f^\tau(x_0)) \tag{2-7}$$

各态历经定理指出，如果存在一个不变测度 ρ，除了一个零测度集之外，那么几乎对所有的初始值 x_0 来说时间平均都是一样的。另外，在满足这个条件下，时间平均与空间平均相等，这就得到了

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\int_0^t \mathrm{d}\tau\boldsymbol{a}(f^\tau(x_0)) = \langle\boldsymbol{a}\rangle \tag{2-8}$$

再介绍一下混合的概念，它用来表征动力系统的统计行为，比各态历经的要求还要苛刻：

$$\lim_{t\to\infty}\langle\boldsymbol{a}(x)\boldsymbol{b}(f^t(x))\rangle = \langle\boldsymbol{a}\rangle\langle\boldsymbol{b}\rangle \tag{2-9}$$

定义沿着给定初值点 x_0 轨道的积分为积分观测量 $\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{A}^t(x_0) = \int_0^t \mathrm{d}\tau\boldsymbol{a}(f^\tau(x_0)) \tag{2-10}$$

函数 f^τ 定义了演化规则。如果动力系统是由迭代映射定义的，这时时间是离散的，$t\to n$，积分观测量 $\boldsymbol{A}$ 为

$$\boldsymbol{A}^n(x_0) = \sum_{k=0}^{n-1}\boldsymbol{a}(f^k(x_0)) \tag{2-11}$$

例如当可观测量是速度时，即 $a_i(x)=v_i(x)$，那么积分观测量就是 $A_i^t(x_0)=x_i(t)$。

可观测量沿着轨道的时间平均定义如下：

$$\overline{\boldsymbol{a}(x_0)} = \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\boldsymbol{A}^t(x_0) \tag{2-12}$$

这里我们假设该极限是存在的，并且 $\boldsymbol{A}(x_0)$ 增长得不比 t 快。时间平均的大小和轨道直接相关，而和该轨道上初始点的选取无关，即

$$\begin{aligned}\overline{\boldsymbol{a}(f^T(x_0))} &= \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\int_t^{t+T}\mathrm{d}\tau\boldsymbol{a}(f^\tau(x_0))\\ &= \overline{\boldsymbol{a}(x_0)} - \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\left(\int_0^T\mathrm{d}\tau\boldsymbol{a}(f^\tau(x_0)) - \int_t^{t+T}\mathrm{d}\tau\boldsymbol{a}(f^\tau(x_0))\right)\\ &= \overline{\boldsymbol{a}(x_0)}\end{aligned}$$

当考虑周期轨道时，积分观测量 $\boldsymbol{A}^t(x_0)$ 和时间平均 $\overline{\boldsymbol{a}(x_0)}$ 的形式很简单，

在微分方程和迭代映射两种情况下分别定义如下：

$$\boldsymbol{A}_p = \begin{cases} \boldsymbol{a}_p T_p = \int_0^{T_p} \mathrm{d}\tau \boldsymbol{a}(f^\tau(x_0)), & \text{连续情况} \\ \boldsymbol{a}_p n_p = \sum_{i=1}^{n_p} \boldsymbol{a}(f^i(x_0)), & \text{分立情况} \end{cases} \tag{2-13}$$

式中，p 是素周期轨道，T_p 和 n_p 分别表示两种情况下的周期。这里介绍一下素周期轨道的概念，与素数类似，素周期轨道不能由更短的周期轨道重复而成。例如，以符号序列标记的周期轨道 $\overline{0}$，$\overline{1}$，$\overline{001}$等都是素周期轨道，而$\overline{0101}$就不是素周期轨道，因为它能分解成两个重复的$\overline{01}$。由于 $\boldsymbol{A}_p$ 是可观测量沿着素周期轨道的环路积分，所以它与初始点 x_0 的选取无关，是周期轨道的内禀性质。在这种情形下，只需在一个周期轨道上估计时间平均式(2-12)的渐近行为就可以了。

$$\boldsymbol{a}_p = \boldsymbol{A}_p / T_p$$

对于双曲系统来说，除了在周期轨道上之外，几乎对所有初始值 x_0，$\overline{\boldsymbol{a}(x_0)}$都取同样的值。

一个量 $\boldsymbol{a}$ 的空间平均就是对空间$\mathcal{M}$中所有的点 x 进行平均：

$$\langle \boldsymbol{a} \rangle(t) = \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x \boldsymbol{a}(f^t(x)) \tag{2-14}$$

式中 $|\mathcal{M}| = \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x$ 表示$\mathcal{M}$的体积。现实中由于任何初始值的差异都会导致完全不同的结果，因此不可能真的去测量时间平均。通常我们会在一些小的域内准备很多个点，设密度分布为 $\rho(x)$，在这种情况下对空间平均的定义需略作修改：

$$\langle \boldsymbol{a} \rangle_\rho(t) = \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x \rho(x) \boldsymbol{a}(f^t(x)) \tag{2-15}$$

对于各态历经和混合的系统，当 $t \to \infty$时任何光滑的初始密度分布都会趋于自然测度，所以不妨设初始的密度分布是常数，即 $\rho(x) = C$。定义可观测量$\langle \boldsymbol{a} \rangle$的期望值为

$$\langle \boldsymbol{a} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x \overline{\boldsymbol{a}(x)} = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{|\mathcal{M}|} \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x \frac{1}{t} \int_0^t \mathrm{d}\tau \boldsymbol{a}(f^\tau(x)) \tag{2-16}$$

期望值先对时间平均，然后再对空间平均，这样做的好处是将仅用时间平均引起的一些由于初始值的不同而带来的问题排除。尽管期望值定义起

来很容易，但实际计算起来却不容易。在这里有个简单的方法，类比统计物理中的配分函数，我们不去直接计算期望值$\langle \boldsymbol{a} \rangle$，而是求

$$\langle e^{\beta \cdot \boldsymbol{A}^t} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{M}|}\int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x e^{\beta \cdot \boldsymbol{A}^t(x)} \tag{2-17}$$

式中 β 是一个无物理含义的辅助变量，它的作用是使我们能通过微分来计算空间平均，

$$\langle \boldsymbol{A}^t \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta}\langle e^{\beta \cdot \boldsymbol{A}^t} \rangle \big|_{\beta=0} \tag{2-18}$$

多数情况下 β 是标量，但它也可以是矢量或者张量。这样处理的优势在于：我们虽然没有直接求期望值，但是只要知道了这个函数，就可以求出一系列与这个可观测量相关的物理量。

如果所有初始值 x_0 的极限$\overline{\boldsymbol{a}(x_0)}$都存在并且系统是各态历经和混合的，那么几乎对所有的轨道时间平均都是一样的，记为$\bar{\boldsymbol{a}}$，积分可观测量则为 $\boldsymbol{A}^t = t\bar{\boldsymbol{a}}$ 。空间平均$\langle e^{\beta \cdot \boldsymbol{A}^t} \rangle$是一个对指数函数的积分，这个积分本身也随着时间呈指数增长。所以我们期待 $t \to \infty$ 时，$e^{\beta \cdot \boldsymbol{A}^t(x)}$ 的空间平均也随着时间指数增长，$\langle e^{\beta \cdot \boldsymbol{A}^t} \rangle \to C e^{ts(\beta)}$ 。反过来 $s(\beta)$可用下面的极限式表示：

$$s(\beta) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln \langle e^{\beta \cdot \boldsymbol{A}^t} \rangle \tag{2-19}$$

那么，式(2-16)的期望值$\langle \boldsymbol{a} \rangle$可由 $s(\beta)$的导数直接得到：

$$\begin{cases} \left.\dfrac{\partial s}{\partial \beta}\right|_{\beta=0} = \lim\limits_{t\to\infty} \dfrac{1}{t} \langle \boldsymbol{A}^t \rangle = \langle \boldsymbol{a} \rangle \\ \left.\dfrac{\partial^2 s}{\partial \beta^2}\right|_{\beta=0} = \lim\limits_{t\to\infty} \dfrac{1}{t} (\langle \boldsymbol{A}^t \boldsymbol{A}^t \rangle - \langle \boldsymbol{A}^t \rangle \langle \boldsymbol{A}^t \rangle) = \lim\limits_{t\to\infty} \dfrac{1}{t} \langle (\boldsymbol{A}^t - t\langle \boldsymbol{a} \rangle)^2 \rangle \end{cases} \tag{2-20}$$

2.1.2　演化算符

通常，我们在式(2-17)中插入以下恒元：

$$1 = \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}y \delta(y - f^t(x)) \tag{2-21}$$

这里 $\delta(y - f^t(x))$是狄拉克函数：初始点 x 在 t 时刻映射到唯一的点 y。那么式(2-17)就可以写成

$$\langle e^{\beta \cdot \boldsymbol{A}^t} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{M}|}\int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}y \delta(y - f^t(x)) e^{\beta \cdot \boldsymbol{A}^t(x)} \tag{2-22}$$

我们把这个计算的核提取出来，记为

$$\mathcal{L}^t(y,x) = \delta(y - f^t(x))\mathrm{e}^{\beta\cdot \boldsymbol{A}^t(x)} \tag{2-23}$$

称为演化算符。它定义了一个线性变化，将一个函数映射到了另一个函数：

$$(\mathcal{L}\phi)(y) = \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x\delta(y - f^t(x))\mathrm{e}^{\beta\cdot \boldsymbol{A}^t(x)}\phi(x) \tag{2-24}$$

因此式(2-22)可以用演化算符来表示

$$\langle \mathrm{e}^{\beta\cdot \boldsymbol{A}^t} \rangle = \frac{1}{|\mathcal{M}|}\int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x\int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}y\phi(y)\ \mathcal{L}(y,x)\phi(x) \tag{2-25}$$

式中 $\phi(x)=1$，是常函数。如果把线性算符 $\mathcal{L}^t$ 看成是一个矩阵的话，那么式(2-19)则可以写成

$$s(\beta) = \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\ln\langle \mathcal{L} \rangle \tag{2-26}$$

我们来看一下演化算符的一个性质。由于 $\boldsymbol{A}^t(x)$沿着轨道可加

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^{t_1+t_2}(x_0) &= \int_0^{t_1} \mathrm{d}\tau \boldsymbol{a}(f^\tau(x)) + \int_{t_1}^{t_1+t_2} \mathrm{d}\tau \boldsymbol{a}(f^\tau(x)) \\ &= \boldsymbol{A}^{t_1}(x_0) + \boldsymbol{A}^{t_2}(f^{t_1}(x_0))\end{aligned} \tag{2-27}$$

所以可以作如下替换：

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{t_2}\mathcal{L}^{t_1}\boldsymbol{a}(y) &= \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}x\delta(y - f^{t_2}(x))\mathrm{e}^{\beta\cdot \boldsymbol{A}^{t_2}(x)}(\mathcal{L}^{t_1}\boldsymbol{a})(x) \\ &= \mathcal{L}^{t_1+t_2}\boldsymbol{a}(y)\end{aligned} \tag{2-28}$$

演化算符产生了一个半群：

$$\mathcal{L}^{t_1+t_2}(y,x) = \int_{\mathcal{M}} \mathrm{d}z\ \mathcal{L}^{t_2}(y,z)\ \mathcal{L}^{t_1}(z,x) \tag{2-29}$$

这个半群的性质正是引入该算符的主要原因。我们把演化算符写成$\mathcal{L}^t = \mathrm{e}^{\mathcal{A}t}$，其中 $\mathcal{A}$为生成元，那么可以将它的本征值写成以下形式：$\{\mathrm{e}^{s_0 t}, \mathrm{e}^{s_1 t}, \mathrm{e}^{s_2 t}, \cdots\}$，相应的本征函数为$\{\phi_0, \phi_1, \phi_2, \cdots\}$。将 $\phi(x)=1$ 用本征函数展开：

$$\phi(x) = 1 = \alpha_0\phi_0 + \alpha_1\phi_1 + \alpha_2\phi_2 + \cdots \tag{2-30}$$

将这个展开式代入式(2-26)，可以得到

$$s(\beta) = \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\ln(\alpha_0\mathrm{e}^{s_0 t}\langle\phi_0\rangle + \alpha_1\mathrm{e}^{s_1 t}\langle\phi_1\rangle + \alpha_2\mathrm{e}^{s_2 t}\langle\phi_2\rangle + \cdots) = s_0 \tag{2-31}$$

所以如果想计算 $s(\beta)$，只需求出$\mathcal{L}$的本征值谱即可。

来看一个例子，假设有一个一维的分段线性映射：

$$f(x)=\begin{cases}f_0=\Lambda_0 x, & x\in\mathcal{M}_0=[0,1/\Lambda_0]\\ f_1=\Lambda_1(x-1), & x\in\mathcal{M}_1=[1+1/\Lambda_1,1]\end{cases}\tag{2-32}$$

式中 $\Lambda_0>1,\Lambda_1<-1$。设在区间[0,1]上分布着一些点，分布密度函数为

$$\rho(x)=\begin{cases}\rho_0, & x\in\mathcal{M}_0\\ \rho_1, & x\in\mathcal{M}_1\end{cases}\tag{2-33}$$

没有定义的那些点不需要定义分布密度函数。这两段函数都把各自的区间映射到[0,1]，经过一次映射，函数会把一些点映射到没有定义的区间上，我们就认为这些点逃逸了。同时，经过一次映射后，分布密度函数也发生了变化，变化规律可以通过下式描述：

$$\mathcal{L}\begin{pmatrix}\rho_0\\ \rho_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{|\Lambda_0|} & \frac{1}{|\Lambda_1|}\\ \frac{1}{|\Lambda_0|} & \frac{1}{|\Lambda_1|}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\rho_0\\ \rho_1\end{pmatrix}\tag{2-34}$$

也就是说，演化算符把 ρ_0 和 ρ_1 都展开到了整个区间，所以每作一次迭代密度就会减少。这个演化算符的本征值为 $e^{s_0}=\frac{1}{|\Lambda_0|}+\frac{1}{|\Lambda_1|}$，所以逃逸率是

$$\gamma=-s_0=-\ln\left(\frac{1}{|\Lambda_0|}+\frac{1}{|\Lambda_1|}\right)\tag{2-35}$$

这说明如果一开始点的分布是均匀的，那么经过一次映射后没有逃逸的点与原来的点比例为 $e^{-\gamma}$。

2.2 迹　公　式

2.1 节我们看到，演化算符的本征值谱对于计算平均值起着至关重要的作用。接下来还将看到演化算符的本征值谱和周期轨道密切相关，而演化算符的迹在这当中充当了桥梁作用，可以通过它来求平均值。这提供了一种严格的并且高度收敛的计算混沌系统中物理量平均值的方法。

2.2.1　离散和连续情况下的迹公式

首先推导离散情况下的迹公式，进而将它推广到连续微分方程的情形。

对$\mathcal{L}^n(x,y)$求迹，得到

$$\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^n = \int \mathrm{d}x\ \mathcal{L}^n(x,x) = \int \mathrm{d}x\delta(x - f^n(x))\mathrm{e}^{\beta\cdot \boldsymbol{A}^n(x)} \tag{2-36}$$

另一方面，由演化算符的半群性质，我们假设$\mathcal{L}$的本征值谱为$\{\mathrm{e}^{s_0},\mathrm{e}^{s_1},\mathrm{e}^{s_2},\cdots\}$，根据 $\mathrm{Re}\ s_\alpha \geqslant \mathrm{Re}\ s_{\alpha+1}(\alpha=0,1,2,\cdots)$排序，那么可以将迹写成

$$\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^n = \sum_{\alpha=0}^{\infty} \mathrm{e}^{s_\alpha n} \tag{2-37}$$

这里暂不考虑求和是否收敛。

讨论一个重要的假设：双曲假设。为了简单又不影响本质，先令 $\beta=0$。一个周期为 n_p 的素周期轨道对迹的贡献可以写成

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}_p\ \mathcal{L}^{n_p} &= \int_{M_p} \mathrm{d}x\delta(x - f^{n_p}(x)) = \frac{n_p}{|\det(\mathbf{1} - \boldsymbol{M}_p)|} \\ &= n_p \prod_{i=1}^{d} \frac{1}{|1 - \Lambda_{p,i}|}\end{aligned} \tag{2-38}$$

式中 $\boldsymbol{M}_p$ 是周期轨道的雅可比矩阵，$\Lambda_{p,i}$是雅可比矩阵的本征值。上式可解释如下：因为 δ 函数的存在，只有满足 $x=f^{n_p}$ 的那些点 x 才对积分有贡献，即周期轨道点。$|\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M}_p)|$是由 δ 函数的积分性质和变量代换的性质产生的。可以看出，如果 $\boldsymbol{M}_p$ 的本征值中出现 1 的话积分将发散。$\Lambda_{p,i}$可分成三类，用$\{e,m,c\}$来分别表示伸展、边缘和收缩。为了使积分有意义，我们要求不能有边缘本征值。将式(2-38)改写为

$$\frac{1}{|\det(\mathbf{1} - \boldsymbol{M}_p)|} = \frac{1}{|\Lambda_p|} \prod_e \frac{1}{1 - 1/\Lambda_{p,e}} \prod_c \frac{1}{1 - 1/\Lambda_{p,c}} \tag{2-39}$$

式中，$\Lambda_p = \prod_e \Lambda_{p,e}$ 代表伸展的本征值乘积。双曲假设要求 M_p 的本征值满足

$$\begin{aligned}|\Lambda_{p,e}| &> \mathrm{e}^{\lambda_e T_p} \\ |\Lambda_{p,c}| &< \mathrm{e}^{-\lambda_c T_p}\end{aligned} \tag{2-40}$$

式中 $\lambda_p,\lambda_c>0$，这说明 $\Lambda_{p,i}$不可能等于 1，而且是以指数的速度远离 1。这样，$t\to\infty$时，$|\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M}_p^r)| \to |\Lambda_p|^r$。后面将会看到这个近似对构造动力学 ζ 函数有着重要作用。

接下来对演化算符的迹作估计。通过求和得到

$$\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^n = \int \mathrm{d}x\ \mathcal{L}^n(x,x) = \sum_{x_i \in Fixf^n} \frac{\mathrm{e}^{\beta\cdot \boldsymbol{A}_i}}{|\det(\mathbf{1} - \boldsymbol{M}^n(x_i))|} \tag{2-41}$$

这里 $Fixf^n=\{x:f^n(x)=x\}$ 表示所有 n 周期轨道点构成的集合，$\boldsymbol{A}_i=\boldsymbol{A}^n(x_i)=r\boldsymbol{A}_p$ 表示积分观测量沿着周期轨道 p 绕 r 次的值。上式是从所有 n 周期轨道点的角度给出演化算符迹的表达式，若从素周期轨道的角度，可将上式改写为

$$\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^n=\sum_p n_p\sum_{r=1}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{r\beta\cdot\boldsymbol{A}_p}}{|\det(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|}\delta_{n,n_pr}\tag{2-42}$$

r 从 1 求和到∞，而 δ_{n,n_pr} 对求和做了限制，它将满足 $n=n_pr$ 的 r 挑了出来，因为只有当素周期轨道的周期能整除 n 时，才对 tr $\mathcal{L}$有贡献。

我们已经有了 tr $\mathcal{L}^n$的表达式，接下来推导如何将它和$\mathcal{L}$的本征值谱联系起来。构造多项式

$$\sum_{n=1}^{\infty}z^n\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^n=\mathrm{tr}\ \frac{z\ \mathcal{L}}{1-z\ \mathcal{L}}=\sum_p n_p\sum_{r=1}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{r\beta\cdot\boldsymbol{A}_p}z^{n_pr}}{|\det(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|}\tag{2-43}$$

这个多项式称为 tr $\mathcal{L}^t$的生成函数，这样通过求和的方式将 δ 函数去掉了。另一方面，直接用 s_α 来表示上式，得到

$$\sum_{\alpha=0}^{\infty}\frac{z\mathrm{e}^{s_\alpha}}{1-z\mathrm{e}^{s_\alpha}}=\sum_p n_p\sum_{r=1}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{r\beta\cdot\boldsymbol{A}_p}z^{n_pr}}{|\det(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|}\tag{2-44}$$

这个式子就是迹公式，它阐释了本征值谱和周期轨道的对偶关系。可以看到，$\mathcal{L}$的本征值就是上式右边的极点，只要计算出极点就得到了$\mathcal{L}$的本征值谱。

上述分析能够推广到连续的情形，tr $\mathcal{L}$ 可以定义成

$$\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^t=\mathrm{tr}\ \mathrm{e}^{\mathcal{A}t}=\int\mathrm{d}x\ \mathcal{L}(x,x)=\int\mathrm{d}x\delta(x-f^t(x))\mathrm{e}^{\beta\cdot\boldsymbol{A}^t(x)}\tag{2-45}$$

通过与离散情况类似的方法，tr $\mathcal{L}$ 的表达式可以写成

$$\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^t=\sum_p T_p\sum_{r=1}^{\infty}\frac{\delta(t-rT_p)}{|\det(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|}\tag{2-46}$$

与离散情况不同的是，δ 函数代替了克罗内克函数。另一方面，对 tr $\mathcal{L}^t$进行拉普拉斯变换

$$\int_\varepsilon^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{-st}\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^t=\sum_p T_p\sum_{r=1}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{r(\beta\cdot\boldsymbol{A}_p-sT_p)}}{|\det(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|}\tag{2-47}$$

可得到连续情形下的迹公式为

$$\sum_{\alpha=0}^{\infty}\frac{1}{s-s_\alpha}=\sum_p T_p\sum_{r=1}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{r(\beta\cdot\boldsymbol{A}_p-sT_p)}}{|\det(\boldsymbol{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|}\tag{2-48}$$

我们用一维分段线性映射的例子来说明迹公式。根据求导的链式法则，当周期轨道的符号序列包含 n_0 个 0 和 n_1 个 1 时，$\Lambda_p=\Lambda_0^{n_0}\Lambda_1^{n_1}$，则式(2-41)变为了

$$\operatorname{tr}\mathcal{L}^n = \sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{1}{|\Lambda_0|\Lambda_0^k}+\frac{1}{|\Lambda_1|\Lambda_1^k}\right)^n \tag{2-49}$$

本征值为

$$e^{s_k} = \frac{1}{|\Lambda_0|\Lambda_0^k}+\frac{1}{|\Lambda_1|\Lambda_1^k} \tag{2-50}$$

从式(2-50)看到当 k 很大时，e^{s_k} 主要是由 0 和 1 中绝对值小的那一个来决定。当 $k=0$ 时，这个本征值的表达式和 2.1 节中的表达式是一致的，但是在 2.1 节中并没有求出除 e^{s_0} 之外的其他本征值。究其原因是我们没有定义演化算子的作用空间，而作用空间对于一个算子的本征值谱起着重要的作用。我们来验证一下迹公式，由上面导出的本征值谱，可以计算出

$$\operatorname{tr}\mathcal{L}\sum_{k=0}^{\infty}e^{s_k n} = \frac{1}{|1-\Lambda_0|}+\frac{1}{|1-\Lambda_1|} \tag{2-51}$$

将此式代入式(2-43)，可以得到

$$\operatorname{tr}\frac{z\mathcal{L}}{1-z\mathcal{L}} = \frac{z\left(\dfrac{1}{|1-\Lambda_0|}+\dfrac{1}{|1-\Lambda_1|}\right)}{1-z\left(\dfrac{1}{|1-\Lambda_0|}+\dfrac{1}{|1-\Lambda_1|}\right)} \tag{2-52}$$

从而验证了式(2-44)的迹公式。

2.2.2　迹公式的渐近形式

本小节讨论迹公式在双曲近似下的渐近行为，可以得到一些有意思的结果。在讨论双曲假设的时候，当 $n\to\infty$ 或 $t\to\infty$ 时，周期轨道权重可近似为：$|\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|\to|\Lambda_p|^r$。在这个近似条件下

$$\operatorname{tr}\mathcal{L}^n = \sum_{i}^{(n)}\frac{1}{|\Lambda_i|} \tag{2-53}$$

$\Gamma_n=\operatorname{tr}\mathcal{L}^n$ 的生成函数可以写成

$$\begin{aligned}\Gamma(z) &= \sum_{n=1}^{\infty}z^n\Gamma_n = \sum_{n=1}^{\infty}z^n\sum_{x_i\in Fixf^n}\frac{e^{\beta\cdot\boldsymbol{A}^n(x_i)}}{|\Lambda_i|}\\ &= z\left\{\frac{e^{\beta\cdot\boldsymbol{A}_0}}{|\Lambda_0|}+\frac{e^{\beta\cdot\boldsymbol{A}_1}}{|\Lambda_1|}\right\}+z^2\left\{\frac{e^{2\beta\cdot\boldsymbol{A}_0}}{|\Lambda_0|^2}+\frac{e^{\beta\cdot\boldsymbol{A}_{01}}}{|\Lambda_{01}|}+\frac{e^{\beta\cdot\boldsymbol{A}_{10}}}{|\Lambda_{10}|}+\frac{e^{2\beta\cdot\boldsymbol{A}_1}}{|\Lambda_1|^2}\right\}+\cdots\end{aligned} \tag{2-54}$$

从素周期轨道的角度，可以将此式改写成

$$\Gamma(z) = \sum_p T_p \sum_{r=1}^{\infty} \left(\frac{z^{n_p} e^{\beta \cdot A_p}}{|\Lambda_p|} \right)^r = \sum_p \frac{n_p t_p}{1 - t_p} \tag{2-55}$$

式中 $t_p = z^{n_p} e^{\beta \cdot A_p} / |\Lambda_p|$。当 $n \to \infty$时，$\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^n \to e^{ns_0}$。$e^{ns_0}$是$\mathcal{L}^n$的最大本征值。这样生成函数近似为

$$\Gamma(z) \approx \sum_{n=1}^{\infty} (z e^{s_0})^n = \frac{z e^{s_0}}{1 - z e^{s_0}} \tag{2-56}$$

即$\mathcal{L}$最大的本征值与生成函数的极点有直接的关系。另一方面，通过上式可以得到

$$\Gamma(z) = -z \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \sum_p \ln(1 - t_p) \tag{2-57}$$

我们记

$$\frac{1}{\zeta(z)} = \prod_p (1 - t_p) \tag{2-58}$$

这个函数称为动力学 ζ 函数，它的名字来自于黎曼 ζ 函数的类比。生成函数的极点，就是 ζ 函数的零点。

2.3　谱行列式和动力学 ζ 函数

2.3.1　离散和连续情况下的谱行列式

从上面的讨论中我们看到，在计算演化算符$\mathcal{L}$的本征值谱时，通过迹公式把它与周期轨道联系在了一起。另一方面，$\mathcal{L}$的本征值谱有直接的表达式：

$$\det(1 - z\mathcal{L}) = \prod_k (1 - z/z_k) \tag{2-59}$$

先来考虑离散的情况，根据公式 $\ln \det X = \mathrm{tr}\ \ln X$，令 $X = 1 - z\mathcal{L}$，代入 $\mathrm{tr}\ \mathcal{L}^n$ 的表达式得到

$$\begin{aligned} \det(1 - z\mathcal{L}) &= \exp\left(-\sum_n^{\infty} \frac{z^n}{n} \mathrm{tr}\ \mathcal{L}^n \right) \\ &= \exp\left(-\sum_p \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} \frac{z^{n_p r} e^{r\beta \cdot A_p}}{|\det(\mathbf{1} - \boldsymbol{M}_p^r)|} \right) \end{aligned} \tag{2-60}$$

这个式子也可以直接用迹公式得到，只需用到下式

$$\mathrm{tr} \frac{z\mathcal{L}}{1 - z\mathcal{L}} = -z \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} \ln \det(\mathbf{1} - z\mathcal{L}) \tag{2-61}$$

上述对于离散映射的谱行列式很容易推广到连续流的情形

$$\det(s-\mathcal{A})=\exp\left(-\sum_p\sum_{r=1}^{\infty}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{e}^{r(\beta\cdot A_p-sT_p)}}{|\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|}\right) \tag{2-62}$$

在这种情况下,将它与迹公式相联系的为下式

$$\mathrm{tr}\frac{1}{s-\mathcal{A}}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\ln\det(s-\mathcal{A}) \tag{2-63}$$

离散和连续情况的对应是 z 和 e^{-s} 的对应。在连续情况下,我们将求演化算符的本征值谱转化为求它的生成元的本征值谱。要求生成元$\mathcal{L}$的本征值谱,只需计算下式的零点

$$\det(s-\mathcal{A})=0 \tag{2-64}$$

可以换一种形式将式(2-64)写成

$$\det(s-\mathcal{A})=\prod_{k_1=0}^{\infty}\cdots\prod_{l_c=0}^{\infty}\frac{1}{\zeta_{k_1\cdots l_c}} \tag{2-65}$$

式中,

$$\frac{1}{\zeta_{k_1\cdots l_c}}=\prod_p\left(1-t_p\frac{\Lambda_{p,e+1}^{l_1}\Lambda_{p,e+2}^{l_2}\cdots\Lambda_{p,d}^{l_c}}{\Lambda_{p,1}^{k_1}\Lambda_{p,2}^{k_2}\cdots\Lambda_{p,e}^{k_e}}\right) \tag{2-66}$$

$$t_p=t_p(z,s,\beta)=\frac{1}{|\Lambda_p|}\mathrm{e}^{\beta\cdot A_p-sT_p}z^{n_p} \tag{2-67}$$

t_p 可以看成是一种与周期轨道 p 相联系的权重,z^{n_p} 则是一辅助的量。而下标 e 和 c 分别代表伸展和收缩两种情况。e^{A_p} 在离散情况下的表达式为

$$\mathrm{e}^{A_p}=\prod_{j=0}^{n_p-1}\mathrm{e}^{a(f^j(x_p))} \tag{2-68}$$

连续情况下对应着

$$\mathrm{e}^{A_p}=\exp\left(\int_0^{T_p}\boldsymbol{a}(x(\tau))\mathrm{d}\tau\right) \tag{2-69}$$

如果是一维的离散映射,谱行列式的表达式有如下简单的形式:

$$\det(\mathbf{1}-z\mathcal{L})=\sum_p\sum_{k=0}^{\infty}(1-t_p/\Lambda_p^k),\quad t_p=\frac{\mathrm{e}^{\beta\cdot A_p}}{|\Lambda_p|}z^{n_p} \tag{2-70}$$

值得注意的是,由于涉及无穷级数求和的收敛半径问题,不能根据 $1-t_p/\Lambda_p^k=0$ 来求零点,由此求得的 z 并不在收敛半径内。

2.3.2　动力学 ζ 函数

前面除了用到双曲假设,还用到了近似 $1/|\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|\rightarrow 1/|\Lambda_p|^r$,通

过迹公式导出了动力学 ζ 函数。现在我们通过谱行列式导出 ζ 函数，当用 $1/|\Lambda_p|^r$ 代替 $1/|\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M}_p^r)|$ 时，

$$\frac{1}{\zeta}=\exp\left(-\sum_p\sum_{r=1}^{\infty}\frac{1}{r}t_p^r\right) \tag{2-71}$$

根据幂级数展开式 $\ln(1-t_p)=-\sum_r t_p^r/r$，$\zeta$ 函数能够写成与式(2-58)完全一样的形式，也可立即得到生成函数的近似公式：

$$\Gamma(s)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\ln\left(\frac{1}{\zeta}\right)=\sum_p\frac{T_pt_p}{1-t_p} \tag{2-72}$$

这与式(2-55)一样。ζ 函数可以定义成与所有周期轨道相联系的 $1-t_p$ 的乘积，$t_p(z,s,\beta)$ 是周期轨道上的局域迹。ζ 函数之所以重要是因为演化算符 $\mathcal{L}$ 的本征值 e^{s_0t} 可以直接通过 $1/\zeta(s)=0$ 算出。

再次以分段线性函数为例来说明 ζ 函数。因为是分段线性的，所以当周期轨道的拓扑序列长度为 n 时，$\Lambda_p=\Lambda_0^m\Lambda_1^{n-m}$，其中 m 代表周期序列中符号 0 的个数。迹有如下简单的形式：

$$\mathrm{tr}\ T^n=\Gamma_n=\left(\frac{1}{|\Lambda_0|}+\frac{1}{|\Lambda_1|}\right)^n \tag{2-73}$$

该情况下的 ζ 函数为

$$\frac{1}{\zeta(z)}=1-z\left(\frac{1}{|\Lambda_0|}+\frac{1}{|\Lambda_1|}\right) \tag{2-74}$$

2.3.3　谱行列式与 ζ 函数的关系

2.3.2 节通过近似的方法从谱行列式导出了 ζ 函数，本小节将介绍 ζ 函数与谱行列式之间的关系。利用恒等式：

$$1=\frac{1}{\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M})}\sum_{k=0}^{d}(-1)^k\mathrm{tr}(\Lambda^k\boldsymbol{M}) \tag{2-75}$$

在一维映射情况下，恒等式有如下形式：

$$1=\frac{1}{1-1/\Lambda}-\frac{1}{\Lambda}\frac{1}{1-1/\Lambda} \tag{2-76}$$

那么

$$\frac{1}{|\Lambda_p^r|}=\frac{1}{|\Lambda_p^r|}\left(\frac{1}{1-1/\Lambda_p^r}-\frac{1}{\Lambda_p^r}\frac{1}{1-1/\Lambda_p^r}\right)$$

可以得到

$$\frac{1}{\zeta}=\frac{\det(\mathbf{1}-z\mathcal{L})}{\det(\mathbf{1}-z\mathcal{L}_1)} \tag{2-77}$$

在这个式子里，把$\mathcal{L}$中的 t_p 替换成 t_p/Λ_p 能够得到$\mathcal{L}_1$。由谱行列式的表达式(2-70)，可以看出 ζ 函数和谱行列式的关系，这两者有一些共同的零点，谱行列式的部分零点则被 $\det(1-z\mathcal{L}_1)$消去。总的来说，尽管我们从谱行列式推导出 ζ 函数时作了一些近似，但它们包含的谱信息还是一样的。

类似地，对应二维哈密顿映射来说，

$$\frac{1}{|\Lambda|}=\frac{1}{|\Lambda|(1-1/\Lambda)^2}(1-2/\Lambda+1/\Lambda^2) \tag{2-78}$$

可得到另一关系式

$$\frac{1}{\zeta}=\frac{\det(1-z\mathcal{L})\det(1-z\mathcal{L}_2)}{\det(1-z\mathcal{L}_1)} \tag{2-79}$$

$\mathcal{L}_1$的本征值为 ζ 函数引入了极点。设 $\lambda_0^{(1)}$ 是其中模最大的那个，那么 ζ 函数展开式的收敛半径则小于 $\left|\frac{1}{\lambda_0^{(1)}}\right|$。也就是说，$\zeta$ 函数的收敛性质和它的极点有关系。

2.4　周期轨道展开

2.4.1　曲率修正

通过前面的讨论我们知道，对于谱行列式和 ζ 函数，它们都可以写成一系列的与素周期轨道相联系的式子的乘积。单个乘子的零点并不是 ζ 函数的零点，我们需要对乘积形式的式子进行展开。以 ζ 函数为例，把它展开成级数和的形式：

$$\frac{1}{\zeta}=\prod_p(1-t_p)=1-\sum_{p_1p_2\cdots p_k}{}'(-1)^{k+1}t_{p_1}t_{p_2}\cdots t_{p_k} \tag{2-80}$$

求和时任意素周期轨道的组合都需要考虑进去。标记

$$t_\pi=(-1)^{k+1}t_{p_1}t_{p_2}\cdots t_{p_k}$$

简化上式为

$$\frac{1}{\zeta}=1-\sum_\pi{}'t_\pi \tag{2-81}$$

当 $k>1$ 时，t_π 是伪周期的权重。之所以称为伪周期，是因为它们是由一些更短的周期轨道组合而成。由式(2-67)，伪周期的权重可以写成

$$t_\pi = (-1)^{k+1}\frac{1}{|\Lambda_\pi|}\mathrm{e}^{\beta\cdot\mathbf{A}_\pi - sT_\pi}z^{n_\pi} \tag{2-82}$$

式中，n_π，$\mathbf{A}_\pi$，T_π 和 Λ_π 分别代表伪周期的拓扑序列长度、积分观测量、周期和稳定性本征值。它们分别有以下表达式：

$$\begin{aligned} &n_\pi = n_{p_1} + \cdots + n_{p_k}, \quad T_\pi = T_{p_1} + \cdots + T_{p_k} \\ &\mathbf{A}_\pi = \mathbf{A}_{p_1} + \cdots + \mathbf{A}_{p_k}, \quad \Lambda_\pi = \Lambda_{p_1}\Lambda_{p_2}\cdots\Lambda_{p_k} \end{aligned} \tag{2-83}$$

为了使表达式简洁，我们假设系统可以用二进制符号来描述。这样，周期轨道的符号序列就可以用 01 来表示。在这种表示下，ζ 函数的表达式为

$$\begin{aligned} \frac{1}{\zeta} =& (1-t_0)(1-t_1)(1-t_{01})(1-t_{001})(1-t_{011})\cdot \\ &(1-t_{0001})(1-t_{0011})(1-t_{0111})\cdots \end{aligned} \tag{2-84}$$

将其展开，根据周期轨道和伪周期轨道拓扑序列的长度来排序

$$\begin{aligned} \frac{1}{\zeta} =& 1 - t_0 - t_1 - t_{01} - t_{001} - t_{011} - t_{0001} - t_{0011} - t_{0111} - \cdots + \\ & t_0t_1 + t_0t_{01} + t_{01}t_1 + t_0t_{001} + t_0t_{011} + t_{001}t_1 + t_{011}t_1 - t_0t_{01}t_1 - \cdots \end{aligned} \tag{2-85}$$

我们称式(2-85)为周期轨道展开，它的精髓是将这些项重新组合。由单个素周期轨道所组成的项为基本部分，记为 t_f，而伪周期轨道项的和为曲率修正部分，记为 c_n，n 指伪周期轨道的拓扑序列的长度和。

$$\begin{aligned} \frac{1}{\zeta} =& 1 - t_0 - t_1 - [(t_{01} - t_0t_1)] - [(t_{001} - t_{01}t_0) + (t_{011} - t_{01}t_1)] - \\ & [(t_{0001} - t_0t_{001}) + (t_{0111} - t_{011}t_1) + (t_{0011} - t_{001}t_1 - t_0t_{011} + t_0t_{01}t_1)] - \cdots \\ =& 1 - \sum_f t_f - \sum_n c_n \end{aligned} \tag{2-86}$$

在我们所采用的 01 符号系统中，t_0 和 t_1 不能由更短的素周期轨道的积来近似，而其他更长的周期轨道或伪周期轨道的项则可以用它们的积来近似，所以它们被称为组成单元。在曲率修正的这些项中，符号为正的项和符号为负的项刚好一一对应，而它们的符号序列如 t_{001} 和 $t_{01}t_0$ 也正好类似。如果所有轨道的权重都是一样的，例如都为 z^{n_p}，那么这些修正项刚好完全抵消。也就是说利用周期轨道展开，ζ 函数只剩下基本部分，它的零点可以立即严格求出。除了分段线性等少数的特殊情况外，所有轨道的权重不会都一样。但

如果系统是连续光滑的，那么具有类似符号序列的项虽然不能严格相消，也是基本上相消。

周期轨道展开的好处是：展开项主要是由短的不稳定周期轨道来主导，长的不稳定周期轨道起到的作用会随着长度的增长变得越来越小。我们要计算 ζ 函数零点的话，给定一个要求的精度，只要对周期轨道展开进行一个截断，根据指数衰减的性质，取有限几个短周期就可以得到很好的结果。

2.4.2　构建轨道展开

周期轨道展开为计算 ζ 函数和谱行列式的零点提供了有效的方法。通常情况下，ζ 函数和谱行列式都是无穷级数，所以对它们进行多项式截断是必然的。接下来讨论如何通过数值的方法计算截断到 N 阶多项式的系数。对于 ζ 函数，形式比较简单，所以计算其指数 $n\leqslant N$ 的系数也比较方便。

不妨给所有的素周期轨道根据长度由短到长排个序，用 i 来做标记。由于要计算到指数 N，所以只需对那些满足 $n_{(i)}\leqslant N$ 的素周期轨道进行乘积即可

$$\frac{1}{\zeta_{(i)}}=\frac{1}{\zeta_{(i-1)}}(1-t_{(i)}z^{n_{(i)}}) \tag{2-87}$$

每一步这样的多项式乘积，我们都对其结果进行截断，使其最高次的指数不大于 N。可得到截断的 N 阶 ζ 函数为

$$\frac{1}{\zeta_N}=1-\sum_{n=1}^{N}c_n z^n \tag{2-88}$$

接下来要计算出这个多项式的最大正根，可用牛顿切线法来求。并不像 ζ 函数那样，轨道权重有积性，计算谱行列式展开的截断到 N 阶的多项式不是直截了当的，因为

$$\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M}_{p_1p_2})\neq\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M}_{p_1})\det(\mathbf{1}-\boldsymbol{M}_{p_2})$$

但是根据式(2-61)，只要知道 $\operatorname{tr}\dfrac{z\mathcal{L}}{1-z\mathcal{L}}$的展开式截断到 N 阶的多项式，就易求谱行列式的展开多项式。根据迹公式，我们记

$$\operatorname{tr}\frac{z\mathcal{L}}{1-z\mathcal{L}}\bigg|_N=\sum_{n=1}^{N}C_n z^n,\quad C_n=\operatorname{tr}\mathcal{L}^n \tag{2-89}$$

由迹公式得到

$$\operatorname{tr}\frac{z\mathcal{L}}{1-z\mathcal{L}}\bigg|_{(i)}=\operatorname{tr}\frac{z\mathcal{L}}{1-z\mathcal{L}}\bigg|_{(i-1)}+n_{(i)}\sum_{r=1}^{n_{(i)}r\leqslant N}\frac{e^{(\beta\cdot\boldsymbol{A}_{(i)}-sT_{(i)}r)}}{\left|\prod(1-\Lambda_{(i),j}^{r})\right|}z^{n_{(i)}r} \tag{2-90}$$

这样就求出了系数 C_n。另外，设谱行列式最后展开式的形式如下，系数用 Q_n 来表示

$$\det(\mathbf{1}-z\mathcal{L})\mid_N=1-\sum_{n=1}^{N}Q_n z^n \tag{2-91}$$

将迹公式和谱行列式的表达式代入式(2-61)的两边，得到

$$(C_1z+C_2z^2+\cdots)(1-Q_1z-Q_2z^2-\cdots)=Q_1z+2Q_2z+3Q_3z^3+\cdots \tag{2-92}$$

对比等式两边的 z^n 的系数，可得到 Q_n 的表达式：

$$Q_n=\frac{1}{n}(C_n-C_{n-1}Q_1-\cdots-C_1Q_{n-1}),\quad Q_1=C_1 \tag{2-93}$$

计算这个多项式根的方法和 ζ 函数的多项式一样，也可以用牛顿法。在这里多项式的根 $z=\mathrm{e}^{-s}$，我们继而可以求得 s，由 s 可以求出各个动力学的平均。

2.4.3　动力学平均值的表达式

想要求出动力学的平均值只要计算 s 对 β 的依赖即可。记 ζ 函数和谱行列式的 N 阶截断多项式为 F，它是 s 和 β 的函数。为了求 s 对 β 的依赖，令 $F(\beta,s(\beta))=0$ 即可求得。通常要计算 s 对 β 的导数和二阶导数，根据隐函数定理，有

$$\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}\beta}=-\frac{\partial F}{\partial\beta}\bigg/\frac{\partial F}{\partial s} \tag{2-94}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2s}{\mathrm{d}\beta^2}=-\left[\frac{\partial^2F}{\partial\beta^2}+2\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}\beta}\frac{\partial^2F}{\partial\beta\partial s}+\left(\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}\beta}\right)^2\frac{\partial^2F}{\partial s^2}\right]\bigg/\frac{\partial F}{\partial s} \tag{2-95}$$

这样，通过上面的两式很容易求出物理中很重要的期望值 $\langle \boldsymbol{a}\rangle$ 和关联函数 $\langle(\boldsymbol{a}-\langle\boldsymbol{a}\rangle)^2\rangle$。

根据 ζ 函数的形式，平均值有着比较简单的解析表达式。我们记

$$\langle \mathbf{A}\rangle=-\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{\zeta}=\sum{}'\mathbf{A}_\pi t_\pi \tag{2-96}$$

若系统无逃逸，当 $\beta=0$ 时，$s(\beta)=0$，此时

$$\langle \mathbf{A}\rangle=\sum_{\pi}{}'(-1)^{k+1}\frac{\mathbf{A}_{p_1}+\mathbf{A}_{p_2}+\cdots+\mathbf{A}_{p_k}}{|\Lambda_{p_1}\cdots\Lambda_{p_k}|} \tag{2-97}$$

我们已经能够计算谱行列式展开的系数 Q_n，用求迹公式展开系数 C_n 的方法，

可以计算上式右边的多项式，如此便可求得$\frac{\partial Q_n}{\partial \beta}$，这样也就知道了$\frac{\partial F}{\partial \beta}$。至于$\frac{\partial F}{\partial s}$，则可通过$\frac{\partial F}{\partial z}$和$z=\mathrm{e}^{-s}$求得。由此，我们得到了通过谱行列式求动力学平均值的方法。

2.5　周期轨道理论面临的问题

本章简单介绍了周期轨道理论。该理论的优点是：首先，只需要得到短的周期轨道就能进行任意有限精度的计算；其次，不稳定周期轨道以及它们的稳定性是动力系统的内在属性，不依赖于坐标选取，我们可以根据需要选择最佳的形式；最后，如果混沌系统是均匀双曲的，轨道展开以指数速度收敛，甚至在某些特殊情况下，轨道展开可以以超指数速度收敛。

周期轨道理论面临的问题也很多。我们遇到的大多数物理系统都不是均匀双曲的，在一些情况下轨道展开的收敛非常慢，控制轨道展开的收敛速率仍然是主要问题。目前已经提出了一些加速收敛的方法[28-30]，但问题还远没有解决。另一个问题是和相空间结构的复杂性相联系的。所有的轨道展开计算，需要系统有序的分类不稳定的周期轨道，为此必须建立符号动力学[31]。遗憾的是，符号动力学只有一维或二维映射的情况能够比较好的建立起来，高维情况仍有很多工作要做。在具体应用时，我们仍然不确定是否已经找齐了一定拓扑长度的不稳定周期轨道，忽略掉一条短轨道就可能给精度带来影响。

除了少数例外的情况，周期轨道理论都需要在一个给定的非线性系统中有效计算短周期轨道。如果系统是高维或者强混沌，许多已有的寻找不稳定周期轨道的方法将会变得效率很低甚至失败。发展可靠且有效的数值方法是周期轨道理论在应用时所面临的巨大挑战。本书第 3 章将介绍几种常用的寻找不稳定周期轨道的数值方法，特别的，我们还将介绍一种用来寻找高维连续流周期轨道的强有力方法。

第 3 章　变分法计算周期轨道

第 2 章介绍了周期轨道理论，应用它计算动力学平均的关键是找齐一定长度内的短周期轨道。本章将首先介绍几种有效寻找低维混沌系统中不稳定周期轨道的数值方法，如牛顿法、多点打靶法。此外还将介绍一种计算周期轨道的新方法：变分法[25]。这种方法既保留了多点打靶法鲁棒性的特点，当搜寻过程已经足够接近于真实的周期轨道时，同时又具有收敛速度快的特点。变分法的物理思想是：首先我们要对想要寻找的不稳定周期轨道作出整体拓扑上的一个粗糙的圈猜想，然后应用变分法来驱使初始猜想的圈朝着真实的周期轨道逐渐演化。该方法为了保持鲁棒性，不是只猜某一条周期轨道上的若干个点，而是先猜出整条轨道；为了实现数值方法的稳定性，采用牛顿下降法代替牛顿-拉弗森迭代法，该方法使得当圈逐渐朝着周期轨道演化时计算得到的成本函数单调递减。本章的最后，我们还将把变分法应用到两个具体实例中，讨论如何计算交叉电磁场中的里德伯原子系统以及勒斯勒方程的周期轨道。

3.1　几种数值寻找周期轨道的方法

3.1.1　逆迭代法

逆迭代法是发现一维映射不稳定周期轨道的一种简单方法。一维映射的不稳定周期轨道的逆映射是稳定的，但问题是逆映射不是单值函数，因此在向后迭代时我们要选择往哪个分支走。符号动力学解决了这个问题，根据要找的周期轨道的符号动力学序列可以决定往哪个分支走，该方法将会自动收敛到要找的轨道上，收敛速度是指数状的。

逆迭代法对于一维映射以及部分二维系统很有效。但该方法的缺点是

当我们不知道逆映射的解析形式时，收敛速度还不是很快。此外，对于高维系统来说该方法完全不适用。所以，寻找周期轨道最好的办法还是直接找到方程 $f^T(x)=x$ 关于 (x,T) 的解。

3.1.2　牛顿法

牛顿法基于在初始猜想 x_0 附近作线性化找到函数 $F(x)$ 的零点 x^*

$$F(x) = F(x_0) + F'(x_0)(x - x_0) \tag{3-1}$$

$F(x)=0$ 的一个近似解是

$$x_1 = x_0 - F(x_0)/F'(x_0) \tag{3-2}$$

该近似解可以用作迭代过程中的一个新的初始猜想点。映射 f 的不动点是 $F(x)=x-f(x)=0$ 的一个解。我们通过迭代式(3-3)来决定 x：

$$\begin{aligned} x_m = g(x_{m-1}) &= x_{m-1} - F(x_{m-1})/F'(x_{m-1}) \\ &= x_{m-1} - \frac{1}{1-f'(x_{m-1})}(x_{m-1} - f(x_{m-1})) \end{aligned} \tag{3-3}$$

假设 $f'(x)\neq 1$，对于足够好的初始猜想，牛顿法将以超指数速度收敛。为了避免牛顿法朝着远离解的方向迭代导致发散，初始化寻找时可以采用阻尼牛顿法：

$$\Delta x_m = x_{m+1} - x_m = -\frac{F(x_m)}{F'(x_m)}\Delta\tau, \quad 0 < \Delta\tau \leqslant 1 \tag{3-4}$$

开始时 $\Delta\tau$ 取小步长，接近解 x^* 的时候采用满步长 $\Delta\tau=1$。

3.1.3　多点打靶法

多点打靶法是寻找周期轨道时常用的一种数值方法，对于绝大多数非线性系统来讲都很有效，该方法用于寻找拓扑长度为 n 的周期轨道。对于长轨道来说，很难给出一个精确的初始点，如果我们借鉴态空间的剖分来猜初值，先猜沿着轨道上的一些点或许可以成功。长度为 n 的周期轨道是 n 维矢量函数 $\boldsymbol{F}$ 的零点：

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{F}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 - f(x_n) \\ x_2 - f(x_1) \\ \vdots \\ x_n - f(x_{n-1}) \end{pmatrix} \tag{3-5}$$

于是可以将牛顿法的迭代写成如下形式：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})=-\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) \tag{3-6}$$

其中$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$是一个 $n\times n$ 的矩阵：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})=\begin{pmatrix} 1 & & & & -f'(x_n) \\ -f'(x_1) & 1 & & & \\ & \cdots & 1 & & \\ & & \cdots & 1 & \\ & & & -f'(x_{n-1}) & 1 \end{pmatrix} \tag{3-7}$$

该矩阵能够通过高斯消元法求逆。举个寻找拓扑长度为 3 的周期轨道的例子，多点打靶法的第一步是：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -f'(x_3) \\ -f'(x_1) & 1 & 0 \\ 0 & -f'(x_2) & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Delta\boldsymbol{x}_1 \\ \Delta\boldsymbol{x}_2 \\ \Delta\boldsymbol{x}_3 \end{pmatrix}=-\begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_1 \\ \boldsymbol{F}_2 \\ \boldsymbol{F}_3 \end{pmatrix} \tag{3-8}$$

$\Delta\boldsymbol{x}_i=\boldsymbol{x}'_i-\boldsymbol{x}_i$ 是对初始猜想 $\boldsymbol{x}_i$ 的修正，$\boldsymbol{F}_i=\boldsymbol{x}_i-f(\boldsymbol{x}_{i-1})$是第 i 个周期点的误差。左边矩阵的第一行乘以 $f'(x_1)$然后和第二行相加，第二行乘以 $f'(x_2)$然后和第三行相加，可以得到：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -f'(x_3) \\ 0 & 1 & -f'(x_1)f'(x_3) \\ 0 & 0 & 1-f'(x_2)f'(x_1)f'(x_3) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Delta\boldsymbol{x}_1 \\ \Delta\boldsymbol{x}_2 \\ \Delta\boldsymbol{x}_3 \end{pmatrix}=-\begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_1 \\ \boldsymbol{F}_2+f'(x_1)\boldsymbol{F}_1 \\ \boldsymbol{F}_3+f'(x_2)\boldsymbol{F}_2+f'(x_2)f'(x_1)\boldsymbol{F}_1 \end{pmatrix} \tag{3-9}$$

接下来需要使左边矩阵的对角线归一化，通过将第三行除以 $1-f'(x_2)f'(x_1)f'(x_3)$就可以实现。其中 $f'(x_2)f'(x_1)f'(x_3)$决定了轨道的稳定性。可以得到

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -f'(x_3) \\ 0 & 1 & -f'(x_1)f'(x_3) \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Delta\boldsymbol{x}_1 \\ \Delta\boldsymbol{x}_2 \\ \Delta\boldsymbol{x}_3 \end{pmatrix}=-\begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_1 \\ \boldsymbol{F}_2+f'(x_1)\boldsymbol{F}_1 \\ \dfrac{\boldsymbol{F}_3+f'(x_2)\boldsymbol{F}_2+f'(x_2)f'(x_1)\boldsymbol{F}_1}{1-f'(x_2)f'(x_1)f'(x_3)} \end{pmatrix} \tag{3-10}$$

然后通过回代 $\Delta\boldsymbol{x}_3$ 的值即给出了点位置的修正。

该方法可以略做修改后用来寻找流的周期轨道。如果我们在截面上猜 $\boldsymbol{x}_k$，经过了 t_k 后再次回到截面上，假定 $\delta\boldsymbol{x}_k$ 和 δt_k 是小量，则根据周期性条件可以得到

$$\boldsymbol{x}_k + \delta\boldsymbol{x}_k = f^{t_k+\delta t_k}(\boldsymbol{x}_k + \delta\boldsymbol{x}_k) \approx f^{t_k}(\boldsymbol{x}_k) + \boldsymbol{J}_k\delta\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{v}_k\delta t_k \tag{3-11}$$

其中，

$$\boldsymbol{v}_k = \frac{\partial f^{t_k}}{\partial t}(\boldsymbol{x}_k), \quad \boldsymbol{J}_k = \frac{\partial f^{t_k}}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}_k) \tag{3-12}$$

写成矩阵的形式为

$$\begin{pmatrix} 1-\boldsymbol{J}_k & -\boldsymbol{v}_k \\ \boldsymbol{a} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \delta\boldsymbol{x}_k \\ \delta t_k \end{pmatrix} = (f^{t_k}(\boldsymbol{x}_k) - \boldsymbol{x}_k) \tag{3-13}$$

左边矩阵最后一行的 $\boldsymbol{a}$ 用来把坐标固定在截面上，解式(3-13)就能得到 $\delta\boldsymbol{x}_k$ 和 δt_k。

3.2 变　分　法

在高维连续流中寻找不稳定周期轨道时，因为系统的拓扑结构很难察觉，即便是猜到了周期轨道上的一个点，牛顿法也很可能会失败。只有像多点打靶法那样，同时猜多个点才有可能成功。为了解决此问题，我们可以再换个思路：采取多点打靶法的逻辑极限，即先来猜出一整条轨道，然后把这条猜想的轨道逐渐演变成真实的周期轨道，这就是本节要详细介绍的变分法。它是一种定位混沌系统周期轨道的强有力的工具，特别是在高维空间中，一些系统的不稳定周期轨道用多点打靶法无法找到，但是变分法却很有效。后面我们讨论 KS 方程及其稳态解的不稳定周期轨道就是采用变分法寻找到的。

在 3.2.1 节我们首先推导一个偏微分方程，它主导了初始猜想圈朝着周期轨道的演化，继而得到相应的成本函数。3.2.2 节我们将介绍该方法在哈密顿动力系统以及对时间进行高次求导系统中的拓展。3.2.3 节介绍变分法在数值上实现的具体步骤。3.2.4 节讨论如何进行圈初始化，以及由于系统对称性带来的简化。

3.2.1　圈演化的变分方程

多点打靶法消除了寻找不稳定周期轨道时所面临的积分一段时间后指数不稳定的困难，它把一条轨道拆分成许多个短的片段，而每一个短的片段都具有可控的展开率。结合牛顿-拉弗森寻根法，多点打靶法是一种寻找映射不稳定周期轨道非常有效的工具。通过在相空间中放置多个相互之间没有交叠的庞加莱截面，寻找连续时间流的不稳定周期轨道原则上可以转化为用多点打靶法寻找一系列映射的不稳定周期轨道。但是在湍流或者高维流系统中，要想合适地选取这样的一系列庞加莱截面是很困难的，要想找到一条周期轨道就需要通过选取多个庞加莱截面来实现。

这里我们换个思路，放弃选取庞加莱截面。我们把时间离散成多个小的时间步长进行迭代，对于足够小的时间步长，这样的迭代变化很小，几乎是不变的。我们在一个光滑的圈 L 上分布许多个点，寻找一条周期轨道时最初猜想该轨道的位置以及它的整体拓扑形状。如果时间步长和圈的变形都取无穷小，那么利用牛顿下降法可以推导出一个偏微分方程，该方程将会把猜测的圈 L 逐渐演变成真正的周期轨道 p，并且是指数收敛的。我们进而能够通过利用已有的解偏微分方程的方法来求解出该周期轨道。

在数学上周期轨道定义为方程(3-14)关于$(\boldsymbol{x}, T)$的解，这里 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d$，$T\in\mathbb{R}$。对于给定的连续流或者离散映射 $\boldsymbol{x}\mapsto\boldsymbol{f}^t(\boldsymbol{x})$，周期轨道的条件是

$$\boldsymbol{f}^T(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}, \quad T > 0 \tag{3-14}$$

所有的周期解构成了不变集合。流的周期轨道通过下面 d 维空间的一阶常微分方程来定义

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \mathcal{M} \subset \mathbb{R}^d, \quad (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}) \in \boldsymbol{T}\mathcal{M} \tag{3-15}$$

这里的$\mathcal{M}$是演化发生的相空间或者称为态空间，$\boldsymbol{T}\mathcal{M}$是切丛。我们假定矢量场$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{x})$几乎处处可微。

现在用一个圈 L 来初始猜想周期轨道 p 的形状及位置，它是一段光滑可微的闭合曲线$\tilde{\boldsymbol{x}}(s)\in L\subset\mathcal{M}$，$s$ 是圈的参量。因为圈是周期的，为了方便起见我们把 s 限定在$[0,2\pi]$，也就是说周期条件为$\tilde{\boldsymbol{x}}(s)=\tilde{\boldsymbol{x}}(s+2\pi)$。假设猜想圈 L 离真实的周期轨道 p 很近，我们沿着圈和周期轨道分别选取 N 个彼此靠得

很近的点：

$$\tilde{\boldsymbol{x}}_n = \tilde{\boldsymbol{x}}(s_n), \quad 0 \leqslant s_1 < \cdots < s_N < 2\pi$$
$$\boldsymbol{x}_n = \boldsymbol{x}(t_n), \quad 0 \leqslant t_1 < \cdots < t_N < T_p \tag{3-16}$$

记 $\delta\tilde{\boldsymbol{x}}_n$ 为圈上的点 $\tilde{\boldsymbol{x}}_n$ 与真实周期轨道 p 上的点 $\boldsymbol{x}_n$ 之间的偏差

$$\boldsymbol{x}_n = \tilde{\boldsymbol{x}}_n + \delta\tilde{\boldsymbol{x}}_n \tag{3-17}$$

假定 $\delta\tilde{\boldsymbol{x}}_n$ 是很小的量，当 L 和 p 重合的时候就为零了。

圈上的速度矢量 $\tilde{\boldsymbol{v}}$ 的方向是和圈 L 相切的：

$$\tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{\boldsymbol{x}}) = \frac{\mathrm{d}\tilde{\boldsymbol{x}}}{\mathrm{d}s} \tag{3-18}$$

它是描述圈特征的量，大小由圈上的参量 s 决定。

对于圈上的每一个点 $\tilde{\boldsymbol{x}}_n \in L$，由此可以看出它包含两个速度矢量：一个是圈的切向速度 $\tilde{\boldsymbol{v}}_n = \tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{\boldsymbol{x}}_n)$，另一个是动力系统流的真实速度 $\boldsymbol{v}_n = \boldsymbol{v}(\tilde{\boldsymbol{x}}_n)$。我们接下来要做的事情是：逐步调整圈 L，直到 $\tilde{\boldsymbol{v}}_n$ 的方向和 $\boldsymbol{v}_n$ 的方向变得一致。即对于所有的 $n=1,2,\cdots,N$，$N\to\infty$ 这个关系都成立，这也就意味着 $L=p$。

为了使它们的大小相匹配，引入一个局域的时间标度因子

$$\lambda(s_n) \equiv \Delta t_n / \Delta s_n \tag{3-19}$$

其中，$\Delta s_n = s_{n+1} - s_n$，$n=1,\cdots,N-1$，$\Delta s_N = 2\pi - (s_N - s_1)$，$\Delta t_n$ 也有类似的表达式。当猜想圈接近真实的周期轨道 p 的时候，标度因子 $\lambda(s_n)$ 用来确保圈的增量 Δs_n 和周期轨道上它的对应部分 $\Delta t_n + \delta t_n$ 成比例。也就是说当 $L\to p$ 时，$\delta t_n \to 0$。

对式(3-15)进行积分可以得到 $x(t)=f^t(x)$，它表示系统在 t 时刻所处的状态，对式(3-20)进行积分可以得到相应的雅可比矩阵 $\boldsymbol{J}(x,t)=\mathrm{d}x(t)/\mathrm{d}x(0)$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{AJ}, \quad A_{ij} = \frac{\partial \boldsymbol{v}_i}{\partial \boldsymbol{x}_j}, \quad \boldsymbol{J}(x,0) = \text{单位矩阵 } \mathbf{1} \tag{3-20}$$

点 $\boldsymbol{x}_n = \tilde{\boldsymbol{x}}_n + \delta\tilde{\boldsymbol{x}}_n$ 处于周期轨道上，

$$f^{\Delta t_n + \delta t_n}(\tilde{\boldsymbol{x}}_n + \delta\tilde{\boldsymbol{x}}_n) = \tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1} + \delta\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1} \tag{3-21}$$

式(3-21)里有两个量：圈上的点 $\tilde{x}_n$ 和到周期轨道上下一个点的时间间隔 Δt_n。运用多元函数微积分公式：

$$f^{t+\Delta t}(x+\Delta x) \approx f^t(x) + \frac{\partial f}{\partial t}\Delta t + \frac{\partial f}{\partial x}\Delta x$$

$$= x(t) + v\Delta t + \boldsymbol{J}\Delta x$$

对这两个量进行线性化

$$f^{\delta t}(x) \approx x + v(x)\delta t$$

$$f^{t}(x + \delta x) \approx x(t) + \boldsymbol{J}(x, t)\delta x$$

对于任意步长 Δt_n 来说，因为

$$\begin{aligned} f^{\Delta t_n + \delta t_n}(\tilde{x}_n + \delta\tilde{x}_n) &= f^{\Delta t_n}(\tilde{x}_n) + \frac{\partial f}{\partial t}\delta t_n + \frac{\partial f}{\partial x}\delta\tilde{x}_n \\ &= f^{\Delta t_n}(\tilde{x}_n) + v(\tilde{x}_n, \Delta t_n)\delta t_n + \boldsymbol{J}(\tilde{x}_n, \Delta t_n)\delta\tilde{x}_n \\ &= f^{\Delta t_n}(\tilde{x}_n) + v_{n+1}\delta t_n + \boldsymbol{J}(\tilde{x}_n, \Delta t_n)\delta\tilde{x}_n \\ &= \tilde{x}_{n+1} + \delta\tilde{x}_{n+1} \end{aligned}$$

可以推导出多点打靶法方程

$$\delta\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1} - \boldsymbol{J}(\tilde{\boldsymbol{x}}_n, \Delta t_n)\delta\tilde{\boldsymbol{x}}_n - \boldsymbol{v}_{n+1}\delta t_n = f^{\Delta t_n}(\tilde{\boldsymbol{x}}_n) - \tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1} \tag{3-22}$$

如果初始猜想足够好的话，解方程式(3-22)会得出一系列的圈 L 以及减小的成本函数

$$F^2(\tilde{\boldsymbol{x}}) \equiv \frac{N}{(2\pi)^2}\sum_{i=1}^{N}(f^{\Delta t_n}(\tilde{\boldsymbol{x}}_n) - \tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1})^2, \quad \tilde{\boldsymbol{x}}_{N+1} = \tilde{\boldsymbol{x}}_1 \tag{3-23}$$

前面的系数$\frac{N}{(2\pi)^2}$是为了使在 $N\to\infty$ 的极限下，F^2 的定义和后面式(3-28)的成本函数一致。如果流的局部具有很强的不稳定性，全步长的牛顿法很可能会失败，F^2 会越来越大而不是变得越来越小，这种情况下应该采用减小步长的阻尼牛顿法。这时如果采用合适的步长，F^2 就会单调减小[32]，选择无穷小的步长能够保证 F^2 单调递减。接下来引入一个虚拟的时间变量 τ 来表示圈的连续形变。

固定 Δs_n，用 $\delta\tau$ 推进每一步迭代，这意味着把式(3-22)的右边乘上 $\delta\tau$。根据式(3-19)，有

$$\delta t_n = (\partial\lambda/\partial\tau)(s_n, \tau)\delta\tau\Delta s_n$$

因为

$$\delta\tilde{x}_n = (\partial/\partial\tau)\tilde{x}(s_n, \tau)\delta\tau$$

方程(3-22)的两边同除以 $\delta\tau$，同时把 δt_n 的表达式代入就会得到

$$\frac{\delta\tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1}}{\mathrm{d}\tau} - \frac{\boldsymbol{J}(\tilde{\boldsymbol{x}}_n, \Delta t_n)\mathrm{d}\tilde{\boldsymbol{x}}_n}{\mathrm{d}\tau} - \boldsymbol{v}_{n+1}\frac{\partial\lambda}{\partial\tau}(s_n, \tau)\Delta s_n = f^{\Delta t_n}(\tilde{\boldsymbol{x}}_n) - \tilde{\boldsymbol{x}}_{n+1} \tag{3-24}$$

在 $N\to\infty$ 的极限下，步长 $\Delta s_n, \Delta t_n = O(1/N)\to 0$，所以有

$$v_{n+1} \approx v_n$$

$$\tilde{x}_{n+1} \approx \tilde{x}_n + \tilde{v}_n \Delta s_n$$

$$J(\tilde{x}_n, \Delta t_n) \approx 1 + A(\tilde{x}_n)\Delta t_n$$

$$f^{\Delta t_n}(\tilde{x}_n) \approx \tilde{x}_n + v_n \Delta t_n$$

把这些近似表达式代入式(3-24)，同时利用标度关系式(3-19)改写式(3-24)，最终可以推导出

$$\frac{\partial^2 \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s \partial \tau} - \lambda \mathbf{A} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial \tau} - \boldsymbol{v} \frac{\partial \lambda}{\partial \tau} = \lambda \boldsymbol{v} - \tilde{\boldsymbol{v}} \tag{3-25}$$

这个偏微分方程描述了圈 $L(\tau)$ 朝着真实的周期轨道 p 的演变过程，是变分法最重要的公式之一。由此算出一系列的圈是由参数 $\tilde{\boldsymbol{x}} = \tilde{\boldsymbol{x}}(s,\tau) \in L(\tau)$ 标定的，s 代表圈上点的位置，虚拟时间 τ 标定圈的形变，λ 用来控制周期。我们把这种无穷小步长的阻尼牛顿-拉弗森方法称为牛顿下降法。变分法的示意图如图 3.1 所示。

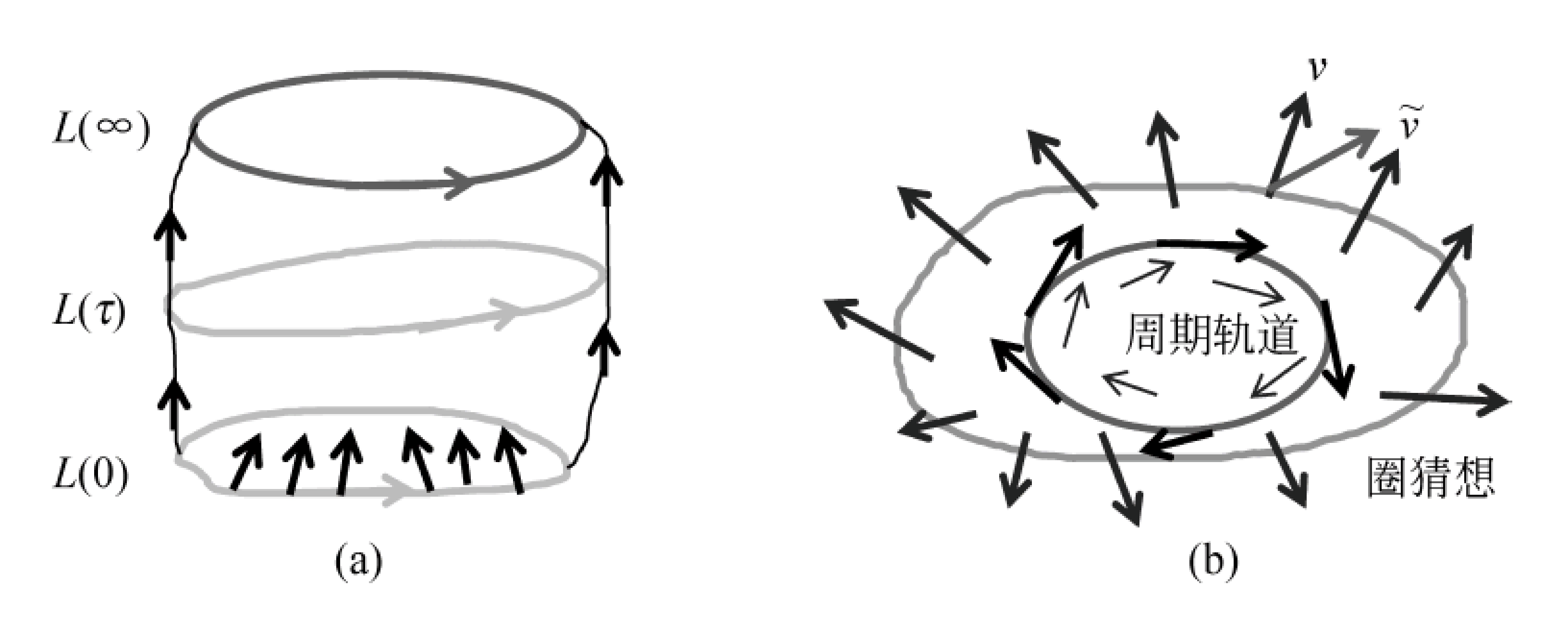


图 3.1　变分法示意图

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

(a) 牛顿下降法得到一个环 $L(\tau)$，它使得初始的圈猜想 $L(0)$ 逐渐演变成周期轨道 $p=L(\infty)$；
(b) 通常猜想圈 $L(\tau)$ 的速度场 $\tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{x})$ 和系统速度场的方向 $\boldsymbol{v}(\tilde{x})$ 是不一样的，但是对于周期轨道 p 来说，两者在每一点都是一样的，牛顿下降法通过把圈演变成周期轨道这一过程让两者逐渐吻合

方程(3-25)还有一个重要的特点：存在一个减小的成本函数。利用

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \tau} = \mathbf{A} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial \tau}$$

改写方程(3-25)，

$$\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{v}}}{\partial \tau} - \lambda \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \tau} = -(\tilde{\boldsymbol{v}} - \lambda \boldsymbol{v}) \tag{3-26}$$

得到

$$(\widetilde{\boldsymbol{v}} - \lambda \boldsymbol{v}) = \mathrm{e}^{-\tau}(\widetilde{\boldsymbol{v}} - \lambda \boldsymbol{v})\big|_{\tau=0} \tag{3-27}$$

所以当圈朝着周期轨道演化时，下面的成本函数在单调递减

$$F^2[\widetilde{x}] = \frac{1}{2\pi}\oint_{L(\tau)} \mathrm{d}\,\widetilde{x}\,[\widetilde{\boldsymbol{v}}(\widetilde{x}) - \lambda \boldsymbol{v}(\widetilde{x})]^2 \tag{3-28}$$

每进行一步迭代，圈的切向速度方向和动力系统流的速度方向的差别就会减小。当 $\tau \to \infty$ 时，圈的切向速度 $\widetilde{\boldsymbol{v}} = \lambda \boldsymbol{v}$ 就和动力系统的流矢量一致，此时圈 $\widetilde{\boldsymbol{x}}(s,\tau) \in L(\tau)$ 就收敛到了动力系统流 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x})$ 定义的真实的周期轨道 $p = L(\infty)$ 上来。一旦算出了周期轨道 p，由式(3-19)和 $\lambda(s,\infty) = (\mathrm{d}t/\mathrm{d}s)(\widetilde{\boldsymbol{x}}(s,\infty))$，轨道的周期可以通过下式算出：

$$T_p = \int_0^{2\pi} \lambda(\widetilde{\boldsymbol{x}}(s,\infty))\mathrm{d}s \tag{3-29}$$

当然，既然此时已经找出了这条周期轨道，便可以取周期轨道 p 上的一个点作为初始点，直接对动力系统式(3-15)进行积分来计算轨道的周期。

数值计算时，直接使用牛顿下降法的式(3-25)会面临两个潜在的困难。首先面临的问题是，当我们已经计算出了一条周期轨道，这些点经过一个周期的变化之后仍然是周期轨道。因此下面的算符

$$\bar{\mathbf{A}} = \frac{\partial}{\partial s} - \lambda \mathbf{A}$$

在轨道上存在一个本征值为零的边缘本征矢 $\boldsymbol{v}(\widetilde{x}(s))$。如果固定了 λ，当圈朝着周期轨道演变时，方程式(3-25)取得极限值

$$\bar{\mathbf{A}}\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \tau} = 0$$

所以在周期轨道上，算符 $\bar{\mathbf{A}}$ 的逆就会变得奇异，这会带来数值问题。

我们通过在方程式(3-25)中加入限制条件来解决该困难。在寻找一些非线性系统的不稳定周期轨道时，可以通过引入一个庞加莱截面来解决这个困难。例如，固定圈上某个点的其中一个坐标分量，令 $\widetilde{\boldsymbol{x}}_1(s_2,\tau) =$ 常数，这就打破了周期轨道的平移不变性。其他限制条件的选择要根据所面临的具体问题而定，例如，我们可以要求圈上各点的平均移动为零，这样就避免了在计算轨道的过程中产生的缓慢减小。

第二个潜在的困难在于自由选择圈的参数。圈上 L 可能出现点的不均匀分布，某些地方离散化的点 $\widetilde{x}_n$ 会稠密聚集，而另外一些地方则留下了大片

的空缺，从而降低了圈的数值平滑度。

我们通过选择不依赖于 s 的常数标度 $\lambda(s,\tau)=\lambda(\tau)$ 来解决这一困难。在均匀网格大小 $\Delta s_n=\Delta s$ 以及固定 λ 的条件下，圈的参数 $s=t/\lambda$ 是和时间 t 成比例的，式(3-25)使圈上这些离散点随时间均匀分布。当圈演变成周期轨道后，可以通过式(3-25)计算出 $\partial\tilde{x}/\partial\tau$，轨道的周期通过 $T_p=2\pi\lambda$ 计算出来。

尽管这里只是研究如何找出周期轨道，但是牛顿下降法是一种普适的方法。我们将在本书第 6 章里介绍，通过适当的修改点的分布以及边界条件，可以用式(3-25)来计算连接轨道。在处理两点边值问题时，牛顿下降法类似于拟线性化方法，它的优势在于解决问题时可以调节自由参量 $\lambda(s,\tau)$ 的大小，而且只需在相空间里关心的子流形范围内进行寻找。对子流形约束的一个简单例子是寻找给定能量大小的周期轨道，即限制在哈密顿系统的相空间 $H(q,p)=E$ 这样的一个能壳。此外，我们也需要考虑到哈密顿方程的对称性结构会大大减少子流形的维数。

3.2.2　牛顿下降法的拓展

经典力学中变分原理的解即粒子的运动轨迹，这一原理称为哈密顿变分原理。奥布里-马瑟(Aubry-Mather)理论关于准周期解存在性的证明是可以变分的，人们由此意识到变分法能够非常可靠地并且高精度地计算二维甚至更高维的扭结映射模型的长周期轨道[33]。这里我们不在圈动力学上应用最小作用变分原理，而是用牛顿下降法。流再次使得成本函数最小化，这次我们匹配加速度的误差，逐步调整圈上的加速度使之演变为周期轨道。

可以降低变分计算的维数。哈密顿变分原理告诉我们经典粒子的运动轨迹是哈密顿主函数的极值(或者说，对于固定的能量 E，作用量 $S=R+Et$)

$$R(q_1,t_1;q_0,t_0)=\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t\,\mathcal{L}(q(t),\dot{q}(t),t) \tag{3-30}$$

其中 $\mathcal{L}(q,\dot{q},t)$ 是拉格朗日量。给定一个圈 $L(\tau)$，我们不仅能够计算出切向速度矢量 $\tilde{\boldsymbol{v}}$，也可以计算出加速度矢量

$$\tilde{\boldsymbol{a}}=\frac{\partial^2\tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s^2} \tag{3-31}$$

上式需要对 s 进行多次求导计算。这里，我们匹配动力系统的加速度 $\boldsymbol{a}(\tilde{\boldsymbol{x}})$ 和圈的加速度 $\tilde{\boldsymbol{a}}(\tilde{\boldsymbol{x}})$ 会求出一个新的成本函数(假定动力系统的加速度是 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 和

$\boldsymbol{v}(\tilde{\boldsymbol{x}})$的函数)，圈演化相应的偏微分方程变成了

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\tilde{\boldsymbol{a}} - \lambda^2 \boldsymbol{a}) = -(\tilde{\boldsymbol{a}} - \lambda^2 \boldsymbol{a}) \tag{3-32}$$

λ^2 代替 λ 是为了与式(3-19)的记号保持一致，也就是说，$t=\lambda s$。用圈的变量 $\tilde{\boldsymbol{x}}(s)$来表示，上面的方程变成了

$$\frac{\partial^3 \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial^2 s \partial \tau} - \lambda \frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{v}} \frac{\partial^2 \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s \partial \tau} - \lambda^2 \frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial \tau} + \left(\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{v}} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s} - 2\lambda \boldsymbol{a} \right) \frac{\partial \lambda}{\partial \tau} = \lambda^2 \boldsymbol{a} - \tilde{\boldsymbol{a}} \tag{3-33}$$

其中 $\boldsymbol{v}=\partial \tilde{\boldsymbol{x}}/\lambda \partial s$。尽管方程(3-33)看起来比方程(3-25)更加复杂，但是在实际对虚拟时间进行数值积分时，得到的额外好处是只用一半的相空间变量即可。

更一般的，如果一个微分方程有如下形式：

$$\boldsymbol{x}^{(m)} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}^{(1)}, \cdots, \boldsymbol{x}^{(m-1)}) \tag{3-34}$$

其中，$\boldsymbol{x}^{(k)}=\mathrm{d}^k \boldsymbol{x}/\mathrm{d}t^k, k=1,\cdots,m, \boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^d$。同样的方法可以被用于匹配最高阶的求导 $\lambda^m \boldsymbol{x}^{(m)}$ 和$\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)}$，

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)} - \lambda^m \boldsymbol{x}^{(m)}) = -(\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)} - \lambda^m \boldsymbol{x}^{(m)}) \tag{3-35}$$

$\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)}=(\partial^m/\partial s^m)\tilde{\boldsymbol{x}}(s)$可以直接通过$\tilde{\boldsymbol{x}}(s)$圈上的微分计算出来。以圈的$\tilde{\boldsymbol{x}}(s)$作为变量，可以得到

$$\frac{\partial^{m+1} \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s^m \partial \tau} - \lambda^m \sum_{k=0}^{m} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}^{(k)}} \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial^k \tilde{\boldsymbol{x}}}{\lambda^k \partial s^k} - m\lambda^{m-1} \tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)} \frac{\partial \lambda}{\partial \tau} = \lambda^m \boldsymbol{x}^{(m)} - \tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)} \tag{3-36}$$

我们假定 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{(0)}, \boldsymbol{x}^{(k)}=\partial^k \tilde{\boldsymbol{x}}/\lambda^k \partial^k s, k=1,\cdots,m-1$。一般来说，式(3-34)可以转变成 md 个一阶微分方程的系统，它的离散求导是带宽为 $5md$ 的带状矩阵。应用式(3-36)，只需要 d 个方程就能达到同样的精度，对应的带宽为$(m+4)d$，计算量大大减少。通过对完整的 md 维相空间的轨道进行作图，可以帮助我们选择一个好的初始圈猜想和对动力系统有更充分的了解，在那里轨道彼此不能相交，流的拓扑特征表现得更为清晰。

拓展方法的最主要问题是数值计算时并不稳定，基于此，我们在实际计算时还是采用式(3-25)。

3.2.3　变分法的数值计算过程

圈上的点满足周期性边界条件，数值积分时需要用到离散快速傅里叶变

换。由于我们只对最后求出的周期轨道感兴趣，需要保证的是在积分过程中圈的平滑度，虚拟时间积分的精度不是很重要，大步长的 $\delta\tau$ 欧拉积分就足够了。变分法计算时最艰巨的一步是对大矩阵 $\bar{\boldsymbol{A}}$ 的求逆。当动力系统式(3-15)相空间的维数很高时，就面临如下问题：为了求解矩阵 $\bar{\boldsymbol{A}}=\frac{\partial}{\partial s}-\lambda\boldsymbol{A}$，需要算 $\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial\tau}$，如果方程的维数很高会使计算变得相当慢。我们使用有限差分方法来解决这个问题，对上述方程进行离散化，用很多个差分来代替微分，用线性方程组代替微分方程。通过这种方法可以把大矩阵 $\bar{\boldsymbol{A}}$ 变得稀疏化，从而更容易快速计算出矩阵的逆。

我们需要对猜想圈进行离散化来保证数值的稳定性，例如可以离散成下面的形式：

$$\tilde{\boldsymbol{v}}_n \equiv \frac{\partial\tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s}\Big|_{\tilde{x}=\tilde{x}(s_n)} \approx (\hat{\boldsymbol{D}}\tilde{\boldsymbol{x}})_n \tag{3-37}$$

在数值计算时采用五点法近似：

$$\hat{\boldsymbol{D}}=\frac{1}{12h}\begin{pmatrix} 0 & 8 & -1 & & & & & & 1 & -8 \\ -8 & 0 & 8 & -1 & & & & & & 1 \\ 1 & -8 & 0 & 8 & -1 & & & & & \\ & & & & & \cdots & & & & \\ & & & & & 1 & -8 & 0 & 8 & -1 \\ -1 & & & & & & 1 & -8 & 0 & 8 \\ 8 & -1 & & & & & & 1 & -8 & 0 \end{pmatrix} \tag{3-38}$$

其中 $h=2\pi/N$。这里的每个矩阵元代表着一个 $d\times d$ 的矩阵，空白处代表零。其中的两个 $2d\times 2d$ 矩阵

$$\boldsymbol{M}_1=\begin{pmatrix} 1 & -8 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{M}_2=\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 8 & -1 \end{pmatrix}$$

分别位于右上角和左下角，用来满足周期性的边界条件。

这样，式(3-25)可以写成以虚拟时间步长 $\delta\tau$ 作为迭代的离散化形式：

$$\begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{A}} & -\hat{\boldsymbol{v}} \\ \hat{\boldsymbol{a}} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \delta\tilde{\boldsymbol{x}} \\ \delta\lambda \end{pmatrix}=\delta\tau\begin{pmatrix} \lambda\hat{\boldsymbol{v}}-\hat{\tilde{\boldsymbol{v}}} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3-39}$$

这里$\hat{\boldsymbol{A}}=\hat{\boldsymbol{D}}-\lambda \mathrm{diag}[A_1,A_2,\cdots,A_N]$，$A_n=\boldsymbol{A}(\tilde{x}(s_n))$通过式(3-20)定义，此外

$$\hat{\boldsymbol{v}}=(v_1,v_2,\cdots,v_N)^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{v}_n=\boldsymbol{v}(\tilde{x}(s_n))$$

$$\hat{\tilde{\boldsymbol{v}}}=(\tilde{v}_1,\tilde{v}_2,\cdots,\tilde{v}_N)^{\mathrm{T}},\quad \tilde{\boldsymbol{v}}_n=\tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{x}(s_n))$$

是我们想要在圈上到处匹配的两个矢量场。$\hat{\boldsymbol{a}}$是一个 Nd 维的行矢量，它给坐标变量 $\delta\tilde{\boldsymbol{x}}=(\delta\tilde{x}_1,\delta\tilde{x}_2,\cdots,\delta\tilde{x}_N)$附加了一个限制条件。离散化的牛顿下降法方程(3-39)是连续流方程(3-13)的一个无限小时间步长多点打靶法。在采用变分方法寻找三维标准映射的周期轨道时，文献[34]也得出了一个和式(3-39)类似的表达式。为了求解圈的坐标变量 $\delta\tilde{\boldsymbol{x}}$ 和周期 $\delta\lambda$，我们需要对等式左边$(Nd+1)\times(Nd+1)$的大矩阵求逆。

数值计算时该矩阵使用带状 LU 分解法(直接三角分解法)来求逆，使用伍德伯里(Woodbury)公式来处理周期和边界项[35]。LU 分解需要的计算时间较长，我们用一个求逆程序来加速积分，方法如下：一旦进行了一步 LU 分解，在下一步接着用它来近似求逆矩阵，通过迭代前面得到的近似逆来实现准确的求逆。在应用时发现，一次的 LU 分解可被使用很多次。当迭代次数超过某一给定的最大数时，就执行下一次的 LU 分解，然后按照之前的方法循环下去。积分的次数用于指示演化的平滑性，我们有根据的调整相应的积分步长 $\delta\tau$：次数越多，则用更大的步长。当圈接近周期轨道时，演化已变得很光滑，这时可以把步长调到 $\delta\tau=1$，恢复成完全无阻尼牛顿-拉弗森迭代法。在实践中，为了得到相对低精度的粗糙解，一开始可以用少量但是合理数量的点。在这之后通过插值更多的点来进一步修正，使得计算更准确。这时 $\delta\tau$ 可以设置为全牛顿步长的最大值 $\delta\tau=1$，从而恢复牛顿-拉弗森法的快速收敛性。

3.2.4　初始化和对称性

和其他的方法一样，对动力系统的定性认识是成功找到周期轨道的一个先决条件。首先对动力系统式(3-15)进行积分，数值积分表明该系统的轨道在哪里比较集中，给我们初始化一个圈，带来第一印象。选取一些几乎闭合的轨道片段，进行快速傅里叶变换，只保留低频率分量。然后对其进行逆快速傅里叶变换回到相空间，就得到了一个光滑的圈，以此作为初始猜想。因

为通常轨道片段是不闭合的，可能会表现出很大的间距，吉布斯现象可以导致构建的初始圈远离感兴趣的区域。为了解决这个问题，我们在执行快速傅里叶变换之前通过手动形变轨道片段使之闭合。寻找转了多圈的更长的不稳定周期轨道需要更精确的初始猜想，一些短的不稳定周期轨道可以帮助建立近似的符号动力学，进而通过切割和粘贴短的、已知的周期轨道来构造更长的周期轨道猜想。对于低维系统，这种方法可以系统地得到很好的长轨道初始猜想。

初始化的另一种方法是利用动力系统的绝热形变，或者称为同伦演化。如果动力系统式(3-15)和参数 μ 有关，当 μ 变化很小时系统的大多数短的不稳定周期轨道可能会继续存在。因此，之前参数 μ_1 的一个周期轨道可以当作之后的一个小变化 $\mu_1 \rightarrow \mu_2$ 的初始猜想圈。在实践中，通常几次迭代就可以得到新的周期轨道。

选择一个好的初始猜想圈大大加快了计算，此外还有更重要的意义。首先，如果我们打破平移变换施加的限制条件，如 $\tilde{x}_1(s_2,\tau)=c$，必须确保初始猜想圈和得到的周期轨道与该庞加莱截面相交。因此，初始的圈猜想不能选得和真实的轨道差别过大。第二，对于式(3-27)，圈总的演化是使成本函数的值减小，同时使离散化的点沿着 $\tilde{\boldsymbol{v}}-\lambda\boldsymbol{v}$ 的方向移动，这是由初始条件决定的。如果局域最小值对应的成本函数是零，那么就计算出了动力系统式(3-15)的一个真正的周期轨道。然而，如果成本函数的最小值不是零，但是梯度为零，式(3-39)就产生了一个奇异矩阵。这种情况下不得不放弃寻找，并重新初始化一个新的猜想圈。如果在寻找不稳定的周期轨道时，不借助于符号动力学的帮助盲目地来猜，会有1/3的概率遇到这种局域极小值的情况。

此外，通常所要研究的系统往往具有一定的对称性，这种情况下对称性很可能给数值计算带来一定的简化。如果动力系统式(3-15)在离散对称下是不变的，当寻找的轨道具有一定的对称性时，可以减少初始猜想圈的长度。这种情况只需对一个不可约的圈片段进行离散化，就能明显降低圈的维度表示。圈的其他部分可通过对称算符复制，然后把这些基本片段排列起来就构成了整体的猜想圈。边界条件不再是周期的，我们只需修改周期项即可。式(3-38)里不再用 M_1 和 M_2，而是用 M_1Q 和 M_2Q^{-1}，其中 Q 是相关的对称算符，它使得基本轨道片段和邻近的片段构成映射。在这种方式下，同样精

度的轨道可通过少部分点来表示，大大加速了寻找。

如果存在连续对称性，也是可以利用的。例如，哈密顿系统的不稳定周期轨道可能形成连续族，族的一个或者多个成员同属于固定的能量表面。为了应对这样的连续族可能带来的临界本征方向，我们改变式(3-39)的最后一行，引入能壳限制来寻找具有特定能量值的不稳定周期轨道。我们在圈上放一个点，记作$\tilde{x}_2$，在常数能量面 $H(\tilde{x})=E$ 上施加限制条件$\nabla H(\tilde{x}_2)\cdot\delta\tilde{x}_2=0$，对于所有的 τ 来说使得$\tilde{x}_2$ 都保持在这个面上。演化式(3-25)会自动将所有其他圈上的点落到相同大小的能量面上。

3.3　交叉电磁场条件下里德伯原子电离回归现象

这一节我们将把变分法应用到保守系统(哈密顿系统)中去，研究交叉场里德伯原子系统的周期轨道。里德伯原子是一个处于高激发态的原子，它的一个价电子被激发到了很高的量子态上，主量子数通常大于 50，电子远离原子实，能级结构和氢原子很接近，因此适用于半经典的计算方法。如果引入互相垂直的外电磁场，那么系统的对称性就会破缺。传统的观点是，电子被电离后将从有界区运动到无穷远处，并且再也不会回到有界区。然而通过变分法计算电子的运动轨迹后发现，当交叉电磁场的强度达到某些特殊值时，电子从有界区电离出去以后并没有运动到无穷远处，存在一定概率的电离回归现象。利用变分法我们也发现了三种新的周期轨道，此外还讨论了这种新奇现象的意义。

3.3.1　背景介绍

原子系统在量子力学诞生和发展的过程中起着非常重要的作用，其中外场条件下的里德伯原子体系一直是人们关注的热点问题。对于里德伯原子来说，由于它具有较大尺寸且能态寿命长、谱线的自然宽度窄等诸多特点，因此在光谱学、天文学、等离子体物理以及半导体物理等众多领域有非常广泛的应用。如果引入互相垂直的外电场与外磁场，那么外加的电磁场和原子就会互相耦合，导致原子体系不再具有旋转对称性。由于里德伯电子的束缚能

非常小，所以外场对里德伯原子的影响非常大，其原子核外电子的运动将呈现出非常复杂的动力学行为[36]，研究里德伯原子的外场效应具有十分重要的意义，而研究体系的周期轨道和连接轨道是理解其混沌动力学性质的重要手段之一。

处于外场中的里德伯原子，由于电场和磁场的共同作用会导致在远离原子实的半径处出现一个除库仑势阱外的另一个势阱[37]，这种在原子体系内部形成的双势阱系统具有很多新奇的性质，例如在第二个势阱中电子和原子实可形成巨大电偶极矩系统[38]。对于交叉场里德伯原子来说，在系统计算体系的周期轨道和连接轨道时，符号动力学的建立是非常重要的，它为相关轨道的数目提供了一个上限，并且能够帮助我们预测轨道的位置，理想情况下保证不会错过任何一条轨道。基于这些重要轨道对其电偶极矩性质展开研究，将会为实现里德伯原子减速等实验研究提供理论支撑。此外，里德伯原子的巨偶极矩性质在量子信息等领域也具有潜在的应用前景，是目前物理学研究的前沿问题。

随着超强、超快激光技术的发展，激光与原子之间的相互作用得到了广泛研究。原子通过吸收一定的光子能量，完成从基态或低激发态再到高激发态的激发，当激光的强度足以使原子吸收的能量大于第一电离阈时，原子就会处于电离态；如果能量合适，则可以使电子跃迁到共振态，一定条件下将产生自电离现象。当里德伯原子在势能的斯塔克鞍点之上发生电离时，自电离态原子在交叉电磁场中的混沌动力学行为是异常复杂的，也是目前关注的焦点问题之一。

1988 年杜孟利和德洛斯（Delos）采用格林函数方法和库仑散射提出了半经典闭合轨道理论[39,40]，成为研究外场中里德伯原子非线性动力学性质的一种重要理论方法，目前人们已经利用该理论成功地解释了外场中碱金属等复杂原子的振荡现象[41,42]。围绕原子在外场中的自电离问题，近年来理论和实验上都有了很大的进展。有关原子自电离过程混沌研究的进展出现在 1996 年，兰克赫依曾（Lankhuijzen）等在研究外场中的铷原子在受短脉冲激光激发的实验中，观测到了电子波包在斯塔克鞍点之上自电离的衰变规律异常[43]：它不同于传统的指数衰变规律，而呈现为总体指数律曲线叠加上一系列不规则的电子脉冲阵列。后来罗比乔克思（Robicheaux）等用量子力学方法计算了

强电场中铷原子的自电离,并对上述实验现象进行了准定量理论解释[44]。为了进一步解释该实验现象的本质,米切尔(Mitchell)和德洛斯等采用半经典的方法,通过相空间庞加莱映射以及相对于不动点的稳定流形和不稳定流形的同宿缠绕,重现了类似的脉冲阵列,对其特殊的分形自相似结构给予了解释[45,46]。在此基础上,他们研究了平行电磁场中的氢原子在经典电离阈以上的混沌性质,揭示了电子电离的脉冲阵列在时域上也具有特殊的分形自相似结构[47,48]。激光冷却技术发明之后,米切尔等从实验上研究超冷原子从光偶极磁光阱中的逃逸问题,他们用同宿缠绕和符号动力学方法证实了分形结构的存在[49]。托普朱(Topcu)等则考虑了衍射及测不准关系,研究了平行电磁场中氢原子的自电离混沌现象[50]。

目前人们已经清楚,外场中氢原子的自电离存在混沌现象主要归结于磁场的存在,王德华教授等研究了氢原子在不同磁场下自电离的混沌现象[51]。林圣路教授课题组研究发现,外电场以及平行电磁场中非氢原子的自电离也存在着混沌现象[52,53]。近来贾锁堂教授课题组对外场作用下超冷里德伯原子的相关物理机制及应用开展了一系列的工作,他们研究了电场中里德伯原子的态混合和态转移的非绝热跃迁机制、超冷铯里德伯原子的自电离机制以及向超冷等离子体的转化过程[54,55]。

在交叉电磁场中里德伯原子体系方面,文献[56]使用多点打靶法计算了交叉场氢原子体系的短周期轨道,该工作以四条简单的周期轨道为基础,找到了类似于三体问题的运动轨道。盖克勒(Gekle)和优瑟(Uzer)等分析了交叉场中氢原子相空间轨道的拓扑规律,他们通过周期轨道研究了环面的相关性质[57]。库尔茨(Kurz)等则研究了核质量为有限大的情况下,里德伯系统的异宿轨道及其电偶极矩性质[58]。刘红平等研究了有关交叉电磁场中里德伯原子的对称性破缺问题,他们用闭合轨道理论研究了里德伯碱金属原子的回归谱,并将经典与量子方法相结合得到了与实验数据相吻合的结果[59,60]。

外场中的里德伯原子是目前少量实际存在的低维体系产生混沌的一个具体实例,它可以展示规则运动向混沌运动的过渡,由于其基本性质是量子的,因此可作为粒子从势场中逃逸以及微腔输运等基本问题的理论模型,成为理论和实验研究量子混沌现象的理想对象,是研究经典和量子对应的典型范例。在交叉场问题中,外加的电磁场和原子互相耦合,两者就像是吸附在

一起的把手一样。通过研究原子的性质，使得我们可以从独特的实验角度观察到量子和经典结合时产生的基本的物理现象。这种手段在各种物理领域里，从原子分子物理到等离子体物理都具有借鉴意义。在这个问题的基础上，其理论特点和可实验性越来越吸引着人们的研究兴趣。

3.3.2 里德伯原子的周期轨道

我们的计算始于处于交叉电磁场条件下里德伯原子系统的经典哈密顿量，该哈密顿量包含了原子核、外场以及电子之间的相互作用。由于现在处理的是里德伯原子，它只有一个电子被激发到了高激发态，原子核仍处于基态上。简明起见规定外电场为 $\boldsymbol{E}=-E\boldsymbol{e}_x$，外磁场为 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$，并且假定原子实的质量为无穷大。电子运动的动力学方程，可以通过下面的 3 自由度哈密顿量来描述：

$$H_{\text{a.u.}}=\frac{1}{2}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)-\frac{1}{r}+\left[\frac{B}{2}(xp_y-yp_x)+\frac{B^2}{8}(x^2+y^2)-\varepsilon x\right] \tag{3-40}$$

其中，$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$，标度之后的电场强度 $\varepsilon=B^{-4/3}E$。哈密顿量的第一项是动能项，第二项是势能项，中括号里面的三项是由外场带来的：第一项是顺磁项，第二项是逆磁项，第三项是原子和电场的相互作用项。由式(3-40)可以用分析力学里的正则变换得到电子运动满足的微分方程如下：

$$\begin{cases}\dot{x}=\dfrac{\partial H}{\partial p_x}=p_x-\dfrac{B}{2}y\\[2mm] \dot{y}=\dfrac{\partial H}{\partial p_y}=p_y+\dfrac{B}{2}x\\[2mm] \dot{z}=\dfrac{\partial H}{\partial p_z}=p_z\\[2mm] \dot{p}_x=-\dfrac{\partial H}{\partial x}=-\dfrac{B}{2}p_y-\dfrac{B^2}{4}x+\varepsilon-\dfrac{x}{r(x^2+y^2+z^2)}\\[2mm] \dot{p}_y=-\dfrac{\partial H}{\partial y}=\dfrac{B}{2}p_x-\dfrac{B^2}{4}y-\dfrac{y}{r(x^2+y^2+z^2)}\\[2mm] \dot{p}_z=-\dfrac{\partial H}{\partial z}=-\dfrac{z}{r(x^2+y^2+z^2)}\end{cases} \tag{3-41}$$

不失一般性，这里首先取 $B=1$。天体物理中定义了希尔区，它在构形空间里

是这样的一个区域：电子不能到达该能量禁闭区。由$\dot{x}=\dot{y}=\dot{z}=0$，可以给出希尔区满足的条件：

$$\varepsilon x+\frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\geqslant -\gamma \tag{3-42}$$

式中 $\gamma(x,y,z,\dot{x},\dot{y},\dot{z})$是能量函数。斯塔克鞍点发生在

$$\begin{gathered} x=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}},\quad y=0,\quad z=0 \\ \dot{x}=0,\quad \dot{y}=0,\quad \dot{z}=0 \end{gathered} \tag{3-43}$$

图 3.2 展示了参数 ε 和 γ 取不同值时，里德伯原子的希尔区投影到 xy 平面上的一些可能的情况。当我们选取某些能量值 γ 以及电场强度值 ε 时，图 3.2 中的“瓶颈”将会闭合，所以电子就不能够被电离掉。从图 3.2 中可以看到，当 $\gamma=-1.52$，$\varepsilon=0.5776$ 时，正是反映发生的临界情况。

图 3.3 展示了不同参数值时一些轨道的 xy 平面投影。起始于有界区的一点会随着时间演化到无界区的无穷远处。注意到轨道对初始条件非常敏感，大多数的轨道最终都会运动到无界区，并且再也不能回到有界区。这就意味着电子在电离后是不能回归的，与经验判断相一致。

暂态对于反应动力学的理论来说是基本的：本质上，暂态是相空间里这样的一个结构，所有参与反应的轨道必须通过它。当选取一些参数时，可以利用变分法在有界区找到一些不稳定的周期轨道。图 3.4 展示了文献里提到的一条周期轨道[61-63]，文献[63]考虑了存在外电磁场的情况，这就破坏了时间可逆性，使得哈密顿量里包含坐标和动量的混合项。通过对其作数学上的变换，可把相应的项变成无磁场时的情况，从而发现了一个暂态。

在图 3.4(a)里，我们初始化时对接近闭合的轨道作快速傅里叶变换，去掉高频模，再作逆快速傅里叶变换就得到了一个粗糙的圈猜想，变分法使得初始猜想圈收敛到真实的周期轨道上。为了核查变分法的有效性，可以用找到的这条周期轨道上的一点做初始条件，通过积分的方法演化一个周期后得到图 3.4(b)的周期轨道，这与图 3.4(a)的结果相一致，从而验证了变分法的适用性。

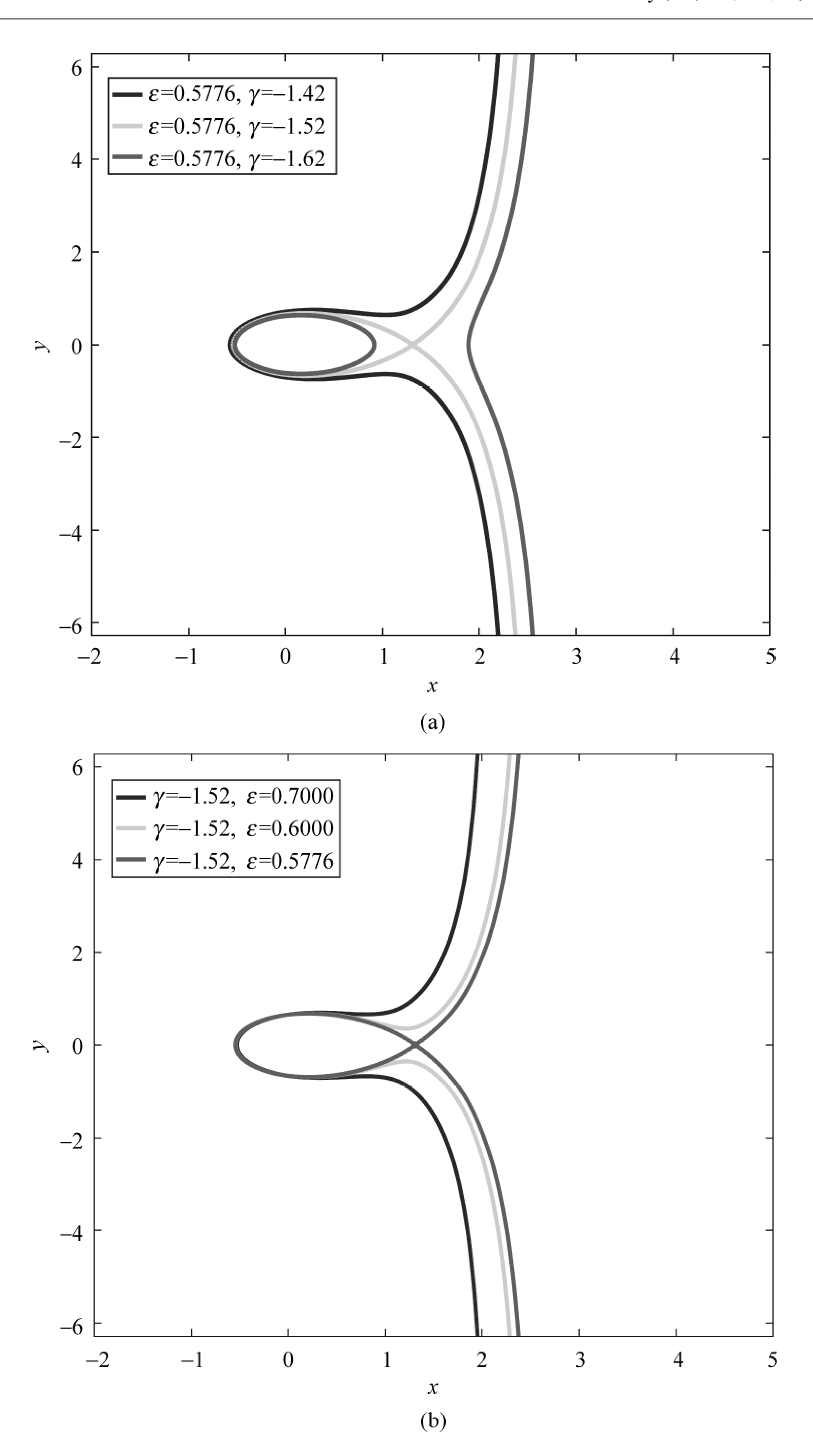


图 3.2　不同参数条件下希尔区的变化情况(xy 平面投影)

(a) 固定 ε 改变 γ；(b) 固定 γ 改变 ε

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

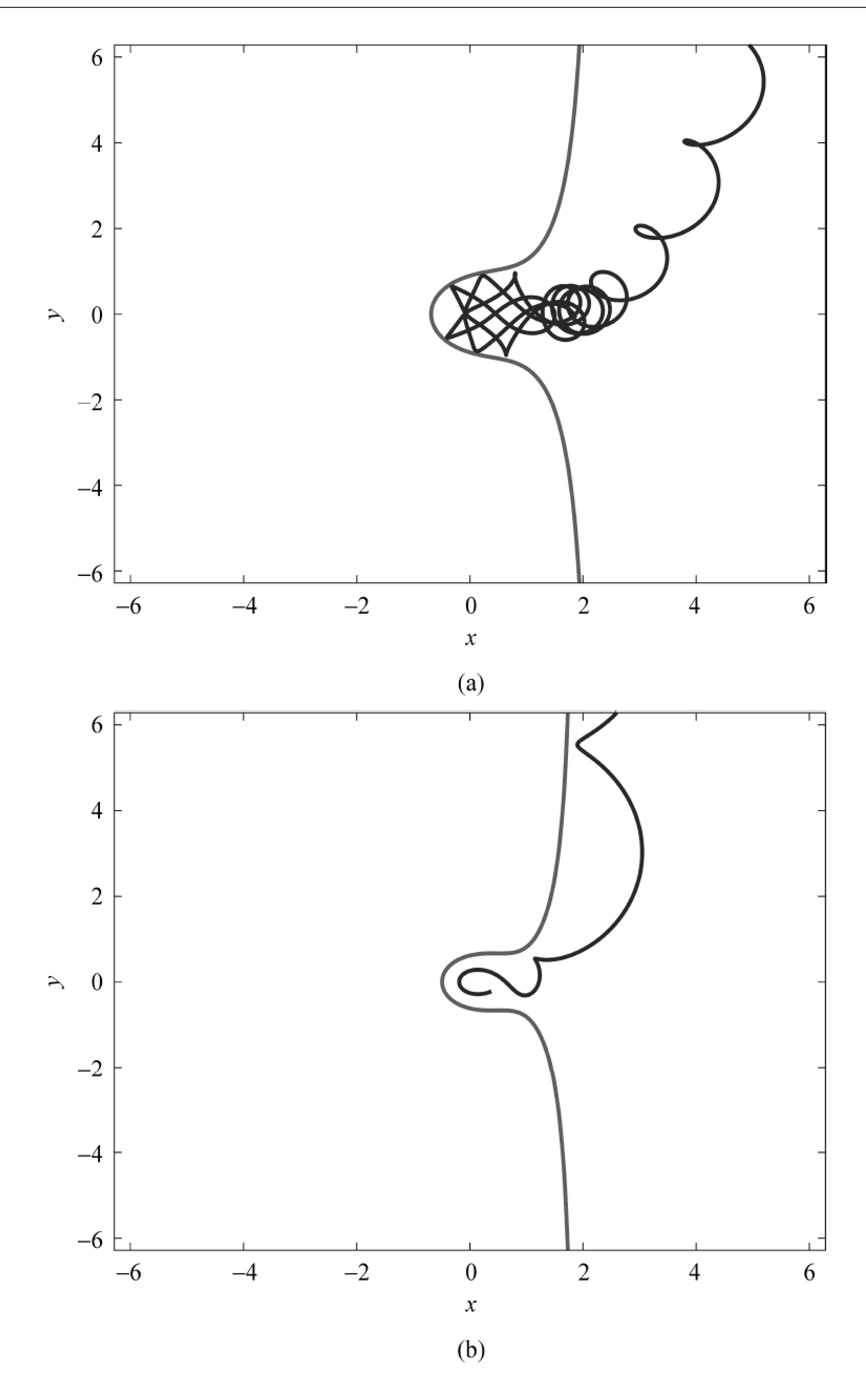


图 3.3　不同初始条件下轨道的演化情况,轨道最终都运动到了无界区并且逃逸掉

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

我们发现了里德伯原子一个新的暂态,它的轨道具有更复杂的结构：电子先是绕着原子核运动,接着再绕斯塔克鞍点运动后形成一条周期轨道,如图 3.5 所示。为了找到这样复杂的轨道,变分法初始化的要求就更高。我们

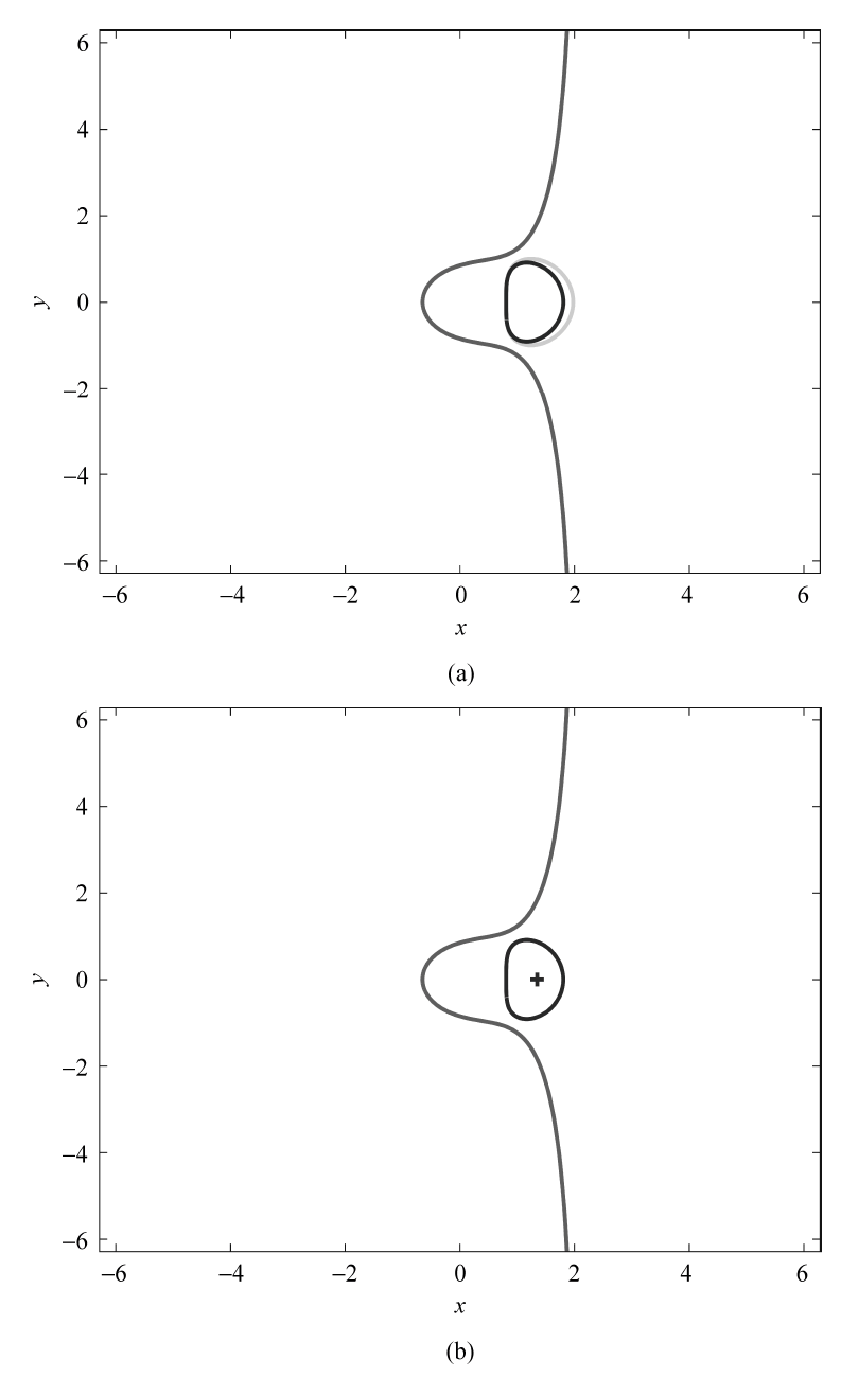


图 3.4　变分法找到的周期轨道，图中的红线是零速度面

(a) 一个周期为 $T=6.492310$ 的轨道(蓝色)以及初始猜想圈(绿色)；

(b) 通过积分方法得到的同样的轨道，加号代表斯塔克鞍点的位置，$\varepsilon=0.55$

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

先是在有界区和临界区分别找出两段接近闭合的轨道，接着手工修补这两段轨道中间的连接线，使这两部分的片段较为平滑地连接在一起，同时要注意轨道运动的方向性。

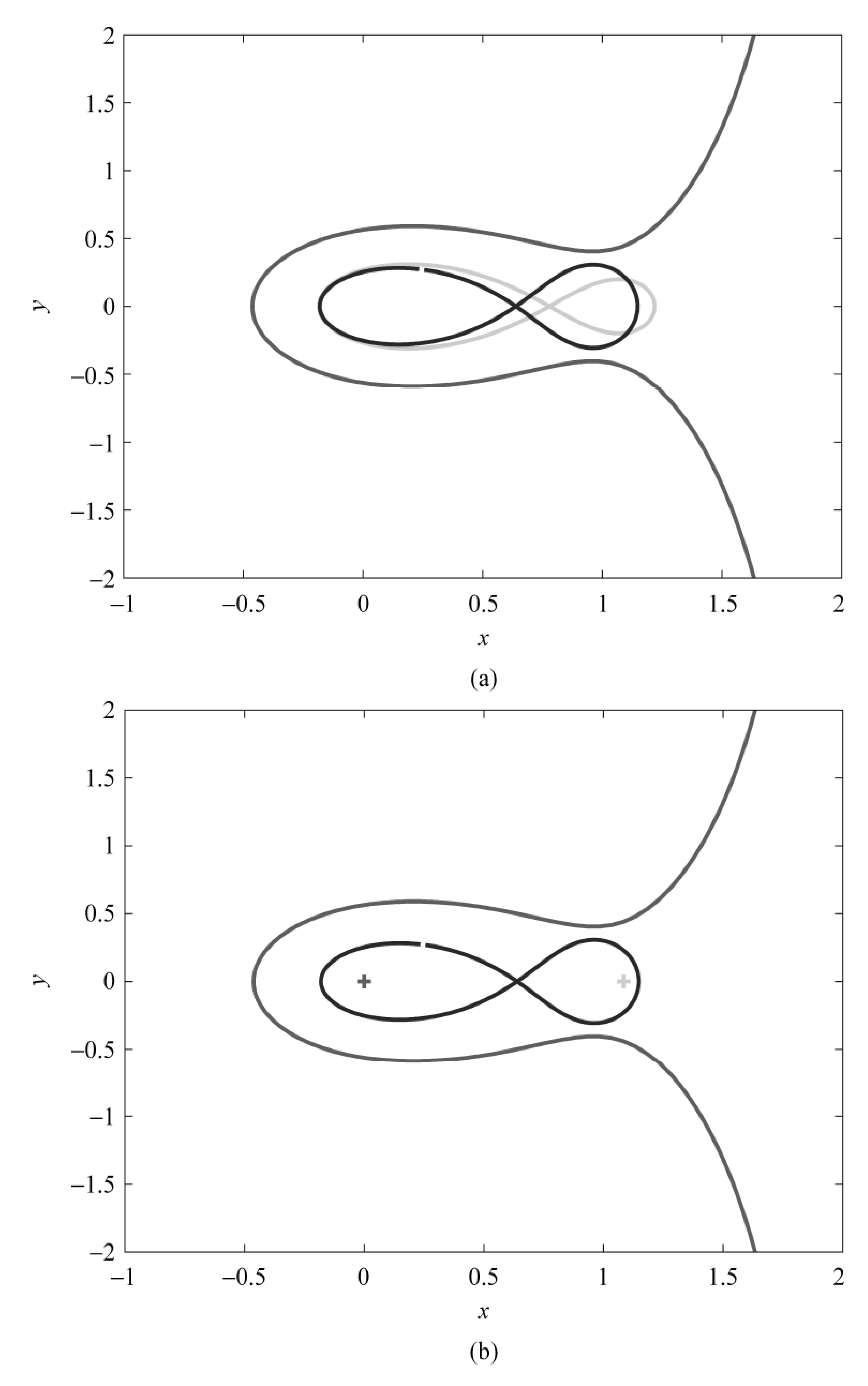


图 3.5　利用变分法计算得到的一个新的暂态

(a) 一条周期为 $T=5.904041$ 的轨道(蓝色)以及初始猜想圈(绿色)；

(b) 积分方法获取的轨道，红色加号代表原子核的位置，绿色加号表示斯塔克鞍点的位置，$\varepsilon=0.85$

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

利用变分法我们找到了另外两条复杂的新周期轨道，如图 3.6 所示，它们的能量大小均为 $\gamma=-1.40$。这两条期轨道具有有趣的拓扑结构，似乎可以利用其将相空间里的其他轨道有序排列出来。

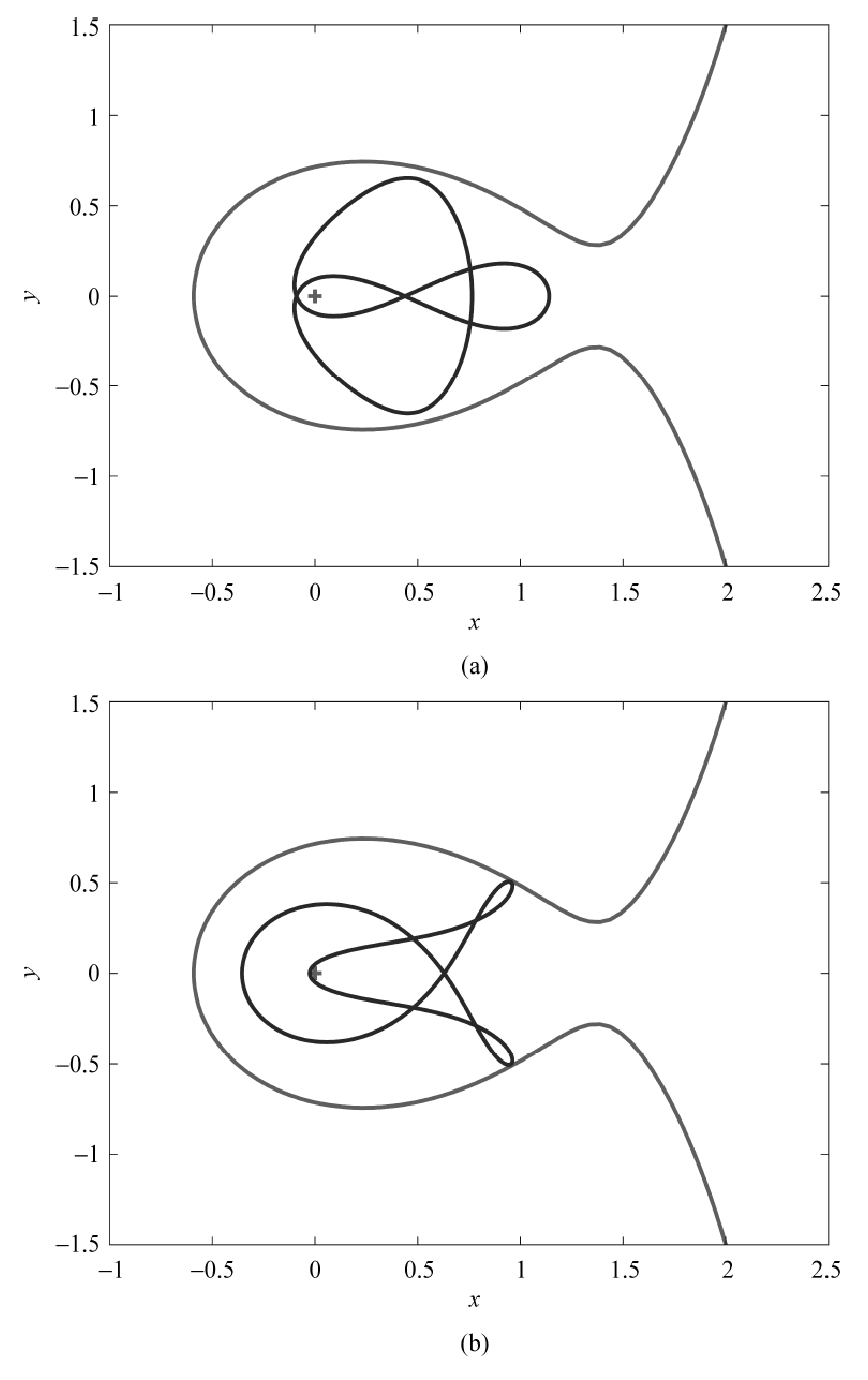


图 3.6 利用变分法计算得到的另外两条周期轨道

(a) 周期为 $T=7.775212$ 的轨道；

(b) 周期为 $T=7.728233$ 的轨道。红色加号代表原子核的位置，$\varepsilon=0.50$

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

3.3.3　电子电离后的回归现象

前面的讨论都是在固定 $B=1$ 情况下的。如果没有磁场,电子超过一定的能量后就会电离。现在考虑固定电场强度值,变化磁场强度的大小来看周期轨道的演变情况,我们发现了电离后的电子具有回归现象。图 3.7(a)展示了当 $\varepsilon=0.55$ 时,不同的磁场强度对应着的轨道的形变情况,可以看到在强磁场条件下,存在着明显的回归现象。当磁场增加到 $B=2$ 以后,继续增加磁场强度效果已不那么明显了,所以我们把 $B=2$ 当作极限情况。可以看到随着磁场强度的增加,电子已经成功地克服了离心力,因此能够重新回到有界区。接下来我们把磁场强度取固定值 $B=2$,改变电场强度的大小,图 3.7(b)展示了不同电场强度下的情况。从图 3.7(b)中看到减小电场强度值也会对电子的回归产生贡献,但是当电场强度小于 $\varepsilon=0.3$ 以后,系统就不存在这样的周期轨道了。

图 3.8 展示了我们找到的最佳电离回归现象[64]。当 $\varepsilon=0.30$,$B=2$ 时,电子在有界区以逆时针的方向运动到无界区,但是没有像通常那样到无界区后向着无穷远运动,它又重新回到了有界区,形成了一条周期轨道。这条周期轨道的周期为 $T=3.202532$,能量的大小为 $\gamma=-0.8764$。这个例子证实了电离回归现象的存在。

上面是理论计算结果。我们注意到电子可通过激光照射获得能量,完成激发过程。在文献[39]和文献[40]中,闭合轨道理论被用于描述暂态过程。电子在距离原子核玻尔半径处向各个方向运动,有一定的角分布,由此形成一个球面波,该过程是一个动态的过程。由于动力学的影响,电子在离开原子核后被实验条件所限定,不能随意运动到周期轨道上。现在考虑在真实的实验环境下,电子是如何离开原子核并运动到暂态上去的。为了核实是否存在这一物理过程,首先要调整一下电磁场的参数,从而能够得到相对稳定的周期轨道。一般来说,暂态的稳定性越高,则电子在该区域附近停留的时间就越长。

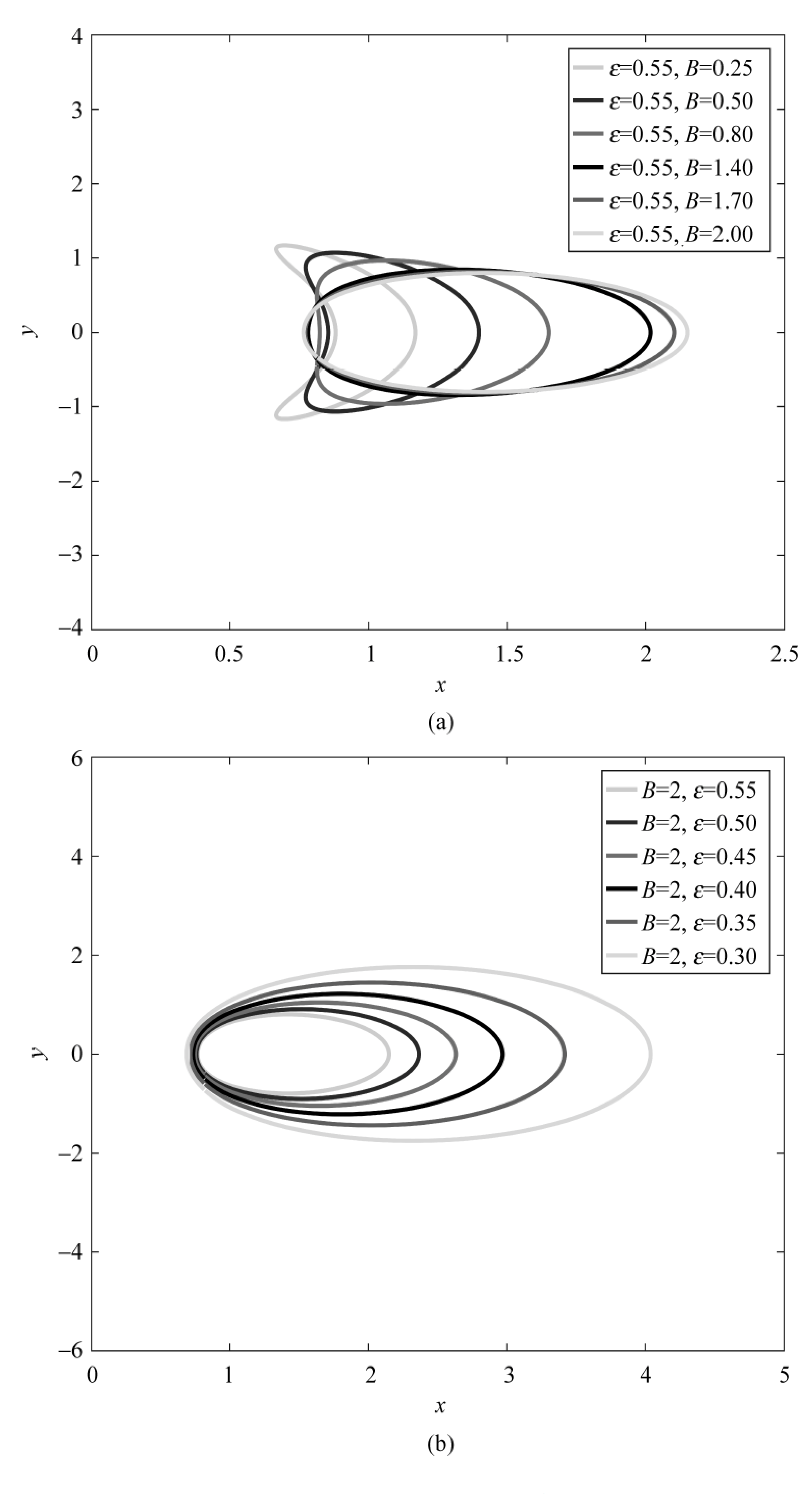


图 3.7　不同电磁场强度时周期轨道的演变情况

(a) 固定 ε,改变 B 的大小;(b) 固定 B,改变 ε 的大小

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

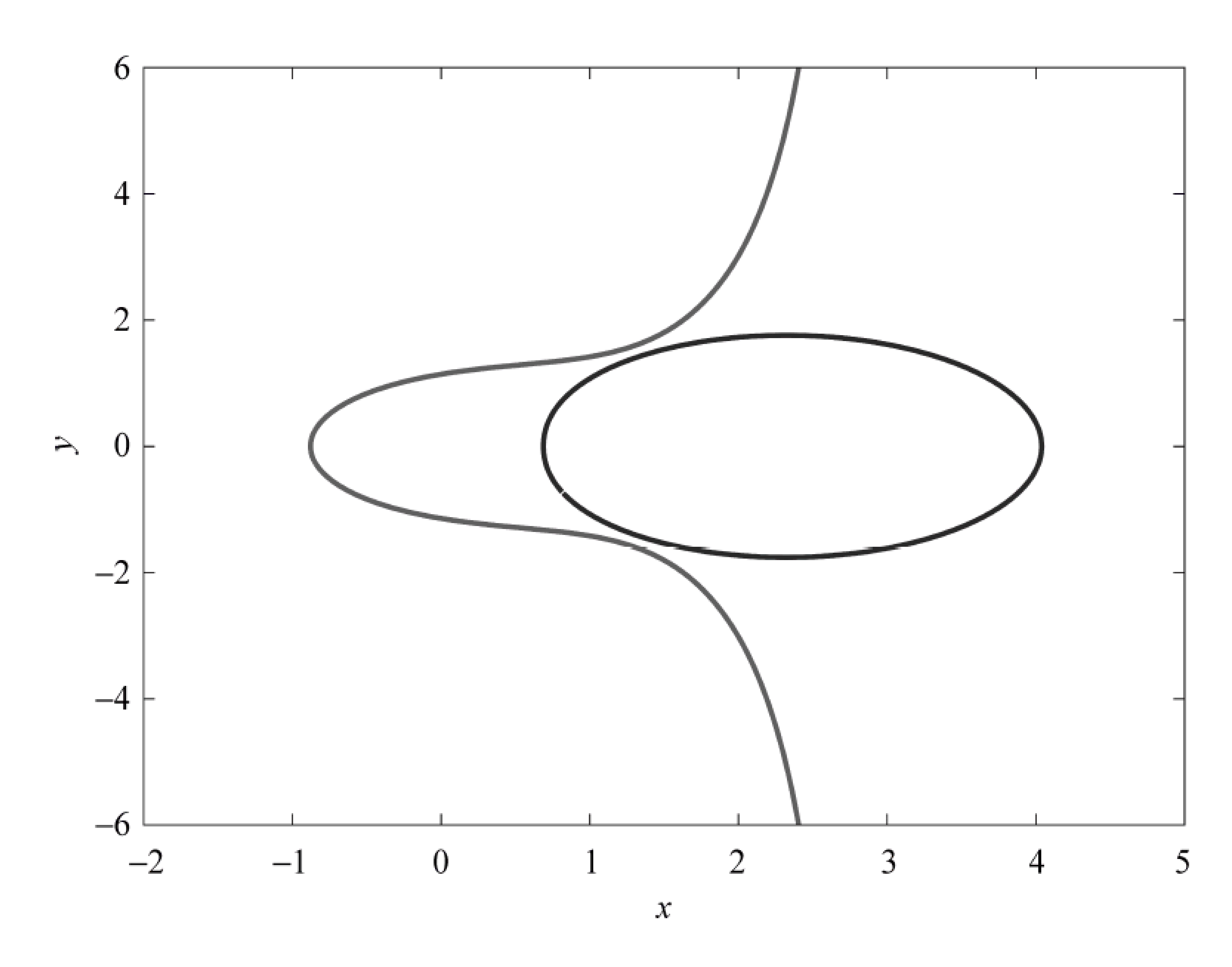


图 3.8　交叉场条件下里德伯原子电子电离后的回归现象，$\varepsilon=0.30$，$B=2$

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

在经过多次尝试和比较后，我们选取 $\varepsilon=0.42$，该周期轨道的雅可比矩阵前三个本征值分别为：1.16039、1.000001 和 1.09325。初始条件是这样选的：用文献[65]中提到的方法，在距原子核玻尔半径远处的球面上均匀选 5000 个点，轨道的初始能量为 −0.8295，这对动量的可能取值起到了制约作用。然后用四阶龙格-库塔法演化这些点，看是否存在接近于周期轨道的演化轨道。我们最终从 5000 条轨道中发现了 10 条轨道，可以在周期轨道附近旋转 1 周。图 3.9(a)展示了其中的一种情况：可以从图中看到演化轨道是可以在周期轨道附近停留一段时间的，这也暗示了该条周期轨道的实际存在性。

在图 3.5(b)中我们所发现的新的暂态，电子绕着原子核运动的最近距离为 0.18 玻尔半径，也就是说小于电子初态的距离，这也暗示了电子是可以沿着该暂态的路径绕着运动一段时间的。我们也计算了该周期轨道的雅可比矩阵，它的前三个本征值分别为：1.28043、1.000001 和 1.32029。基于同样的方法，初始点的能量取为 −1.7761，我们发现了六条轨道具有这一特殊性质。图 3.9(b)展示了其中的一条典型演化轨道以及暂态，可以看到它们之间的形状以及位置都是非常相似的。所以在真实的实验环境下，电子可以沿着暂态的路径运动一段时间。

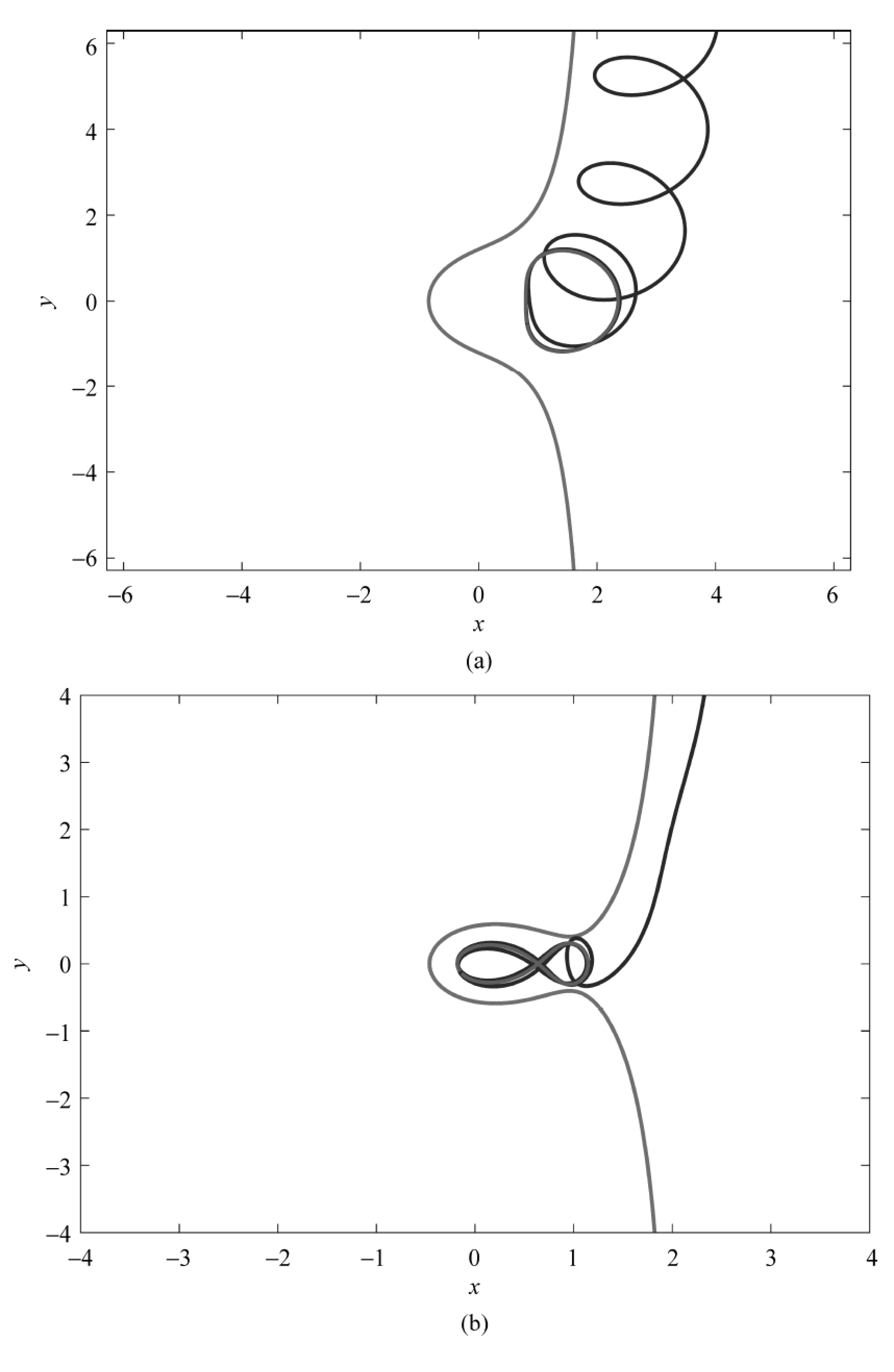


图 3.9　验证电子能否运动到暂态上

(a) 在距离原子核玻尔半径远处演化一个点(蓝色),红色轨道是对应的暂态,ε=0.42;

(b) 相似的演化过程(蓝色),红色轨道是对应的新暂态,ε=0.85

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

里德伯原子电子电离后的回归现象或许可以带来一些物理意义。我们可以通过选择适当的电磁场参数,如果能量刚好比鞍点高一点点,那么在鞍点处的轨道就足够接近于我们发现的周期轨道。因此电子能停留的时间会更长一些,运动也会相对缓慢一些,这也许能够产生有趣的量子现象。同时也可在该处形成较大的电偶极矩,我们或许可以利用这个大的偶极矩来实现里德伯-斯塔克减速以及观测共振现象[66]。

3.3.4　总结

暂态理论用经典的统计方法来决定化学反应速率,该理论基于假定能量再分配是指数状的,以及在相空间里都是均匀的。过去相当长一段时间的研究表明,在这样的系统里存在非常复杂的不一致的动力学,导致混沌输运、黏性以及间歇性混沌现象。

本节我们发现了三种新型的周期轨道,它们或许能够产生有趣的量子效应。同时我们也发现在交叉电磁场条件下,当电磁场的强度取一些特殊值时,里德伯原子电子电离后存在一定概率的回归现象。通常来说,磁场强度越大,电场强度越小,电子电离后就越容易重新回来,我们也讨论了这一新颖现象可能带来的物理意义。

通过动力学的数学计算得出的结论在实际的物理过程中不一定都是真实的。电子从原子核出来后运动位置或许可以到达不稳定的周期轨道上,但是动量却不一定和该周期轨道的动量相匹配。我们也讨论了电子如何能够运动到该周期轨道上来,通过分析,在真实的物理系统中电子的暂态是客观存在的。希望这种现象可以通过相关的实验来得到证实,从而给原子分子物理带来新的积极的意义。

3.4　勒斯勒方程的周期轨道

本节将系统地研究勒斯勒方程一定拓扑长度以内的周期轨道。为了克服此非线性系统中回归映射多值以及不可逆性,我们提出了一种基于轨道拓扑结构建立符号动力学的新方式。变分法用来数值计算此类存在奇怪吸引子的耗散系统的周期轨道显得很稳定,两条轨道片段用于初始化系统的组成

单元。基于整条轨道的结构拓扑的分类方式比传统的通过庞加莱映射剖分态空间显得更为有效，这一工作也为今后在其他混沌体系中系统分类周期轨道提供了一种可借鉴的方法。

3.4.1　背景介绍

对于混沌系统的研究始于 1963 年提出的第一个混沌体系：洛伦兹方程。从那时起，人们相继发现了各种新的混沌系统，对于非线性动力系统的研究取得了长足的进步[67-71]。随着混沌体系研究的系统化，勒斯勒在研究洛伦兹系统时发现了从洛伦兹吸引子中可以获取到一个更简单的、具有不对称的吸引子结构。这促成了一个新的非线性动力系统的发现，它的数值解能够产生奇特的混沌现象，即便方程中仅仅含有一个非线性项。这就是著名的勒斯勒方程[72]。

人们对于勒斯勒方程做了大量的研究工作。在文献[73]中，作者针对分数阶勒斯勒系统，采用解析的方式讨论了劳斯-赫尔维茨(Routh-Hurwitz)稳定性条件。在文献[74]中，作者讨论了勒斯勒吸引子中典型轨道的行为。微分几何方法也能够被用于研究勒斯勒流的雅可比稳定性[75]。最近这些年借助于计算机人们得到了许多关于勒斯勒系统的数值结果。在文献[76]中作者通过时间-频率双谱分析，采用周期闭合圈控制发现了勒斯勒系统的一个非线性特征。在文献[77]中作者详细研究了勒斯勒系统的局域及全局分岔情况，他们讨论了不同种类的混沌吸引子及其系统特性，以此来获取拓扑样板和首次回归映射。在文献[78]中作者比较了完整的勒斯勒系统和约化后系统的时标，他们探究了隐含动力学，观察到了有意义的新动力学特征。文献[79]采用量子理论的方式来研究勒斯勒吸引子，在那里勒斯勒系统相当于一个处于媒质中的三模量子化的电磁场。

混沌体系中轨道初始条件的偏差会导致最终结果的重大区别。由于混沌运动所具有的各态历经性质，本书第 2 章介绍的周期轨道理论可以计算动力学平均。周期轨道理论近些年来也获得了一定的发展[80,81]，对于勒斯勒系统来讲，它将继续起着重要的作用。之前的工作中都没有提到如何有效的系统计算勒斯勒方程的周期轨道。如果在此系统中无法有效建立符号动力学，即使找到了一些周期轨道我们也无法确定到底应该存在多少条，它们彼此之

间有着什么样的联系。本节我们将用变分法计算勒斯勒系统的周期轨道，在态空间中基于轨道的拓扑建立一维符号动力学来分类所有的短周期轨道。

3.4.2　勒斯勒方程的动力学性质

勒斯勒方程由勒斯勒在 1976 年重构洛伦兹方程时提出，后来人们发现此方程在模拟化学反应平衡时很有用。勒斯勒系统由三个微分方程构成，系统性质和洛伦兹方程非常相似。它有一个只折叠一次的带状吸引子，因此更容易分析和计算，勒斯勒系统也是一个最简单的非线性系统，它可以展示混沌体系许多关键的特征。方程的形式为

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=-y-z\\[2ex]\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}=x+ay\\[2ex]\dfrac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}=b+(x-c)z\end{cases}\tag{3-44}$$

其中 a、b 和 c 是方程的三个参数，第三个式子中的 xz 是非线性项。系统的两个不动点为

$$\begin{cases}x_{1,2}=\dfrac{c\pm\sqrt{c^2-4ab}}{2}\\[2ex]y_{1,2}=\dfrac{-c\pm\sqrt{c^2-4ab}}{2a}\\[2ex]z_{1,2}=\dfrac{c\pm\sqrt{c^2-4ab}}{2a}\end{cases}\tag{3-45}$$

由于式(3-45)存在一个二阶非线性项，系统的一个不动点在原点附近，另一个不动点远离吸引子。图 3.10 展示了三维和二维空间中勒斯勒方程的吸引子，参数选取 $a=b=0.2$，$c=5.7$。不动点 $\boldsymbol{x}^-=(0.007,-0.035,0.035)$ 在原点附近，轨道绕着该不动点由内向外运动。当轨道绕了许多圈并且离此不动点有一定距离后，会从 xy 平面运动到 z 方向上，在相空间中呈现伸展结构。由于梅尔尼科夫(Melnikov)同宿轨道的存在[82]，轨道达到一定的高度后，会返回并且进入不动点附近的 xy 平面内，因而呈现折叠运动。由于沿着同宿轨道从空间折回进平面时，与不动点的准确位置总是会有一些差距，所以轨

道又会继续绕着不动点转动,不断地重复上面的过程。

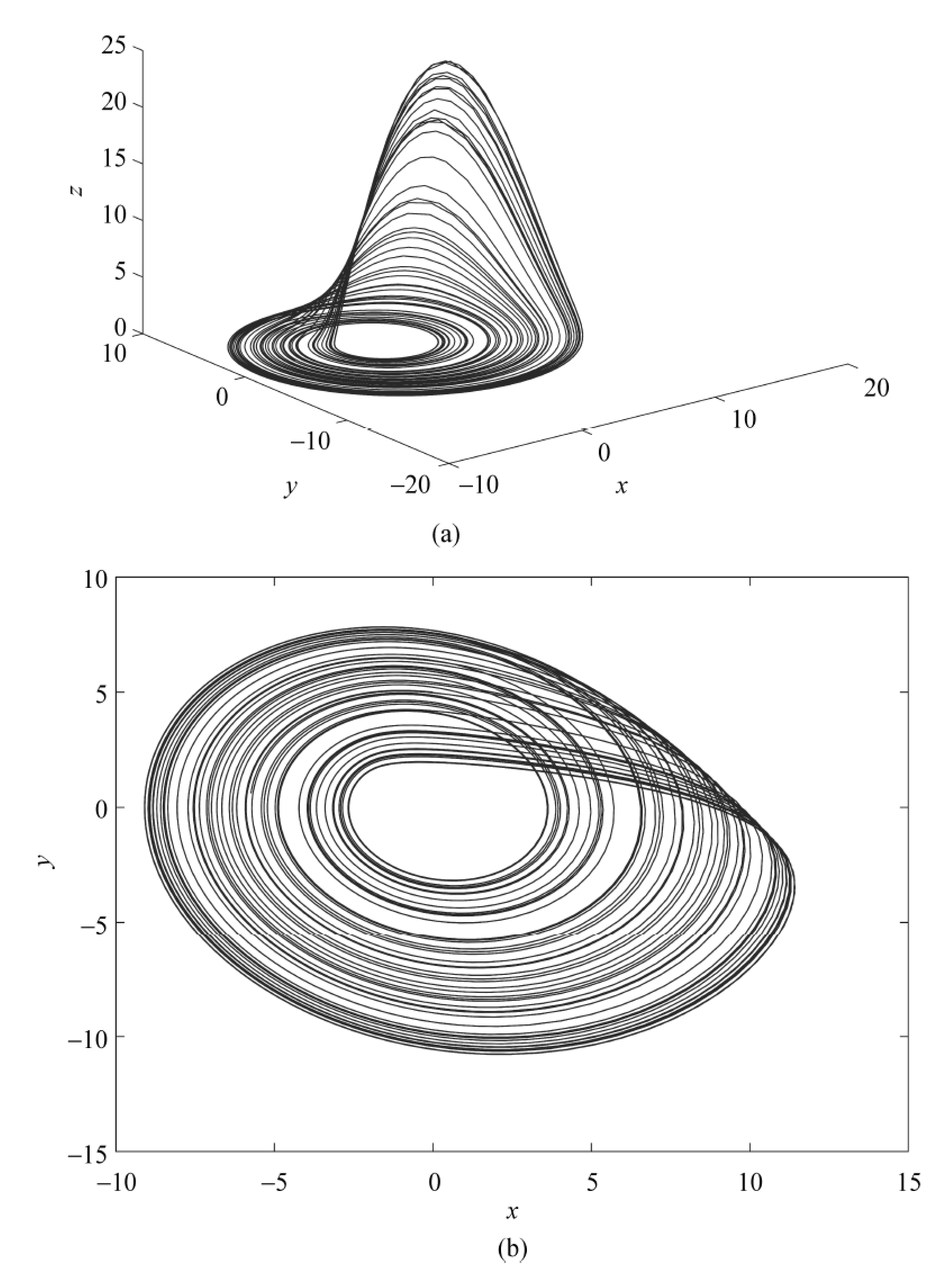


图 3.10　勒斯勒方程在时间 $t=300$ 时的吸引子

(a) 三维情况;(b) 吸引子的二维投影

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

方程式(3-44)在 $a=b=0.2$,$c=5.7$ 时的稳定性矩阵为

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ 1 & 0.2 & 0 \\ z & 0 & x-5.7 \end{pmatrix} \tag{3-46}$$

系统的两个不动点和矩阵式(3-46)的本征值给出了系统的具体性质。外面不动点 $\boldsymbol{x}^{+}=(5.693,-28.465,28.465)$的稳定流形提供了吸引域的边界,稳定矩阵的本征值式(3-47)给出了两个不动点的稳定性信息:

$$\begin{cases}(\mu_{-}^{(1)},\mu_{-}^{(2)}\pm \mathrm{i}\omega_{-}^{(2)})=(-5.686,0.097\pm 0.995\mathrm{i})\\(\mu_{+}^{(1)},\mu_{+}^{(2)}\pm \mathrm{i}\omega_{+}^{(2)})=(0.193,\pm 5.428\mathrm{i})\end{cases}\tag{3-47}$$

通过 $\mu_{-}^{(2)}\pm \mathrm{i}\omega_{-}^{(2)}$ 复数本征值对可知,里面不动点 $\boldsymbol{x}^{-}$ 周围的轨道旋转周期为 $T_{-}\approx\left|\frac{2\pi}{\omega_{-}^{(2)}}\right|=6.31$。$\boldsymbol{x}^{-}$ 不动点附近的轨道旋转一周离开的弗洛凯(Floquet)特征乘子为 $\Lambda_{2}^{-}\approx\exp(\mu_{-}^{(2)}T_{-})=1.84$。相应的,通过 $\mu_{+}^{(2)}\pm \mathrm{i}\omega_{+}^{(2)}$ 复数本征值对可知,外面不动点 $\boldsymbol{x}^{+}$ 周围的轨道旋转周期为 $T_{+}\approx\left|\frac{2\pi}{\omega_{+}^{(2)}}\right|=1.16$。$\boldsymbol{x}^{+}$ 不动点附近的轨道旋转一周吸引到稳定流形平面的弗洛凯特征乘子是极其缓慢的,$\Lambda_{2}^{+}\approx\exp(\mu_{+}^{(2)}T_{+})=0.9999$。在每一个周期,稳定流形上的点沿着不稳定的本征方向远离的弗洛凯特征乘子为 $\Lambda_{1}^{+}\approx\exp(\mu_{+}^{(1)}T_{+})=1.2497$。因此外面的不动点 $\boldsymbol{x}^{+}$ 沿着两个方向都旋转得极其缓慢。为了在此混沌体系中找到周期轨道,首先尝试利用庞加莱截面把它约化为一维映射,进而借助多点打靶法进行计算。

从图 3.10 可见,轨道绕着 z 轴旋转,因此可以选择一个通过 z 轴的平面作为庞加莱截面。不同倾斜角的截面会产生不同情况的映射,从而显示出体系的伸展和折叠结构。图 3.11 展示了选取与 x 轴成 45°的一个庞加莱截面后的二维映射图样,由此可以获取回归映射的信息。符号动力学为我们找齐一定拓扑长度的周期轨道提供了便利,为此,这里介绍一下符号动力学的概念。

考虑一维单峰映射

$$f(x)=3.3x(1-x),x\in[0,1]\tag{3-48}$$

它的图像如图 3.12 所示,在 $x=0.5$ 处 $f(x)$取极大值。因此可以用两个符号来建立系统的符号动力学,即 $\Sigma=\{0,1\}$。0 对应着 x 取极大值处左边的区间,1 对应着右边的区间。根据迭代,任何轨道都唯一对应着一段无穷的符号序列,$s_1s_2s_3\cdots,s_i\in\Sigma$,那么周期轨道就可以通过一个周期序列给出。本书第 2 章里介绍了素周期轨道的概念,以符号序列标记的周期轨道 $\overline{0}$、$\overline{1}$、$\overline{001}$等都是素周期轨道,而$\overline{0101}$就不是素周期轨道。长度为 2 的周期轨道可以由序列

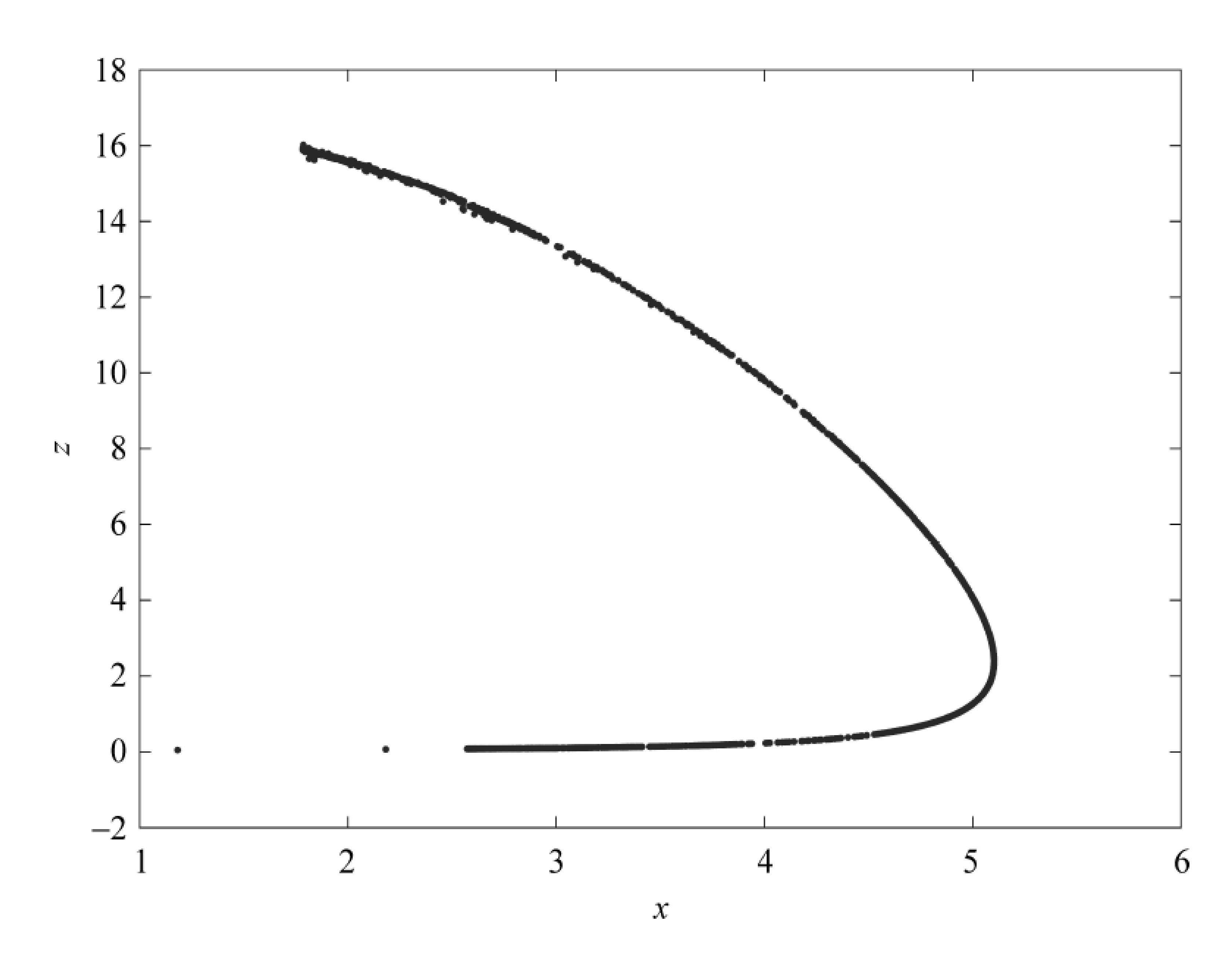


图 3.11　勒斯勒方程的二维庞加莱映射，我们选取通过 z 轴的截面作为庞加莱截面，它与 x 轴成 45°

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

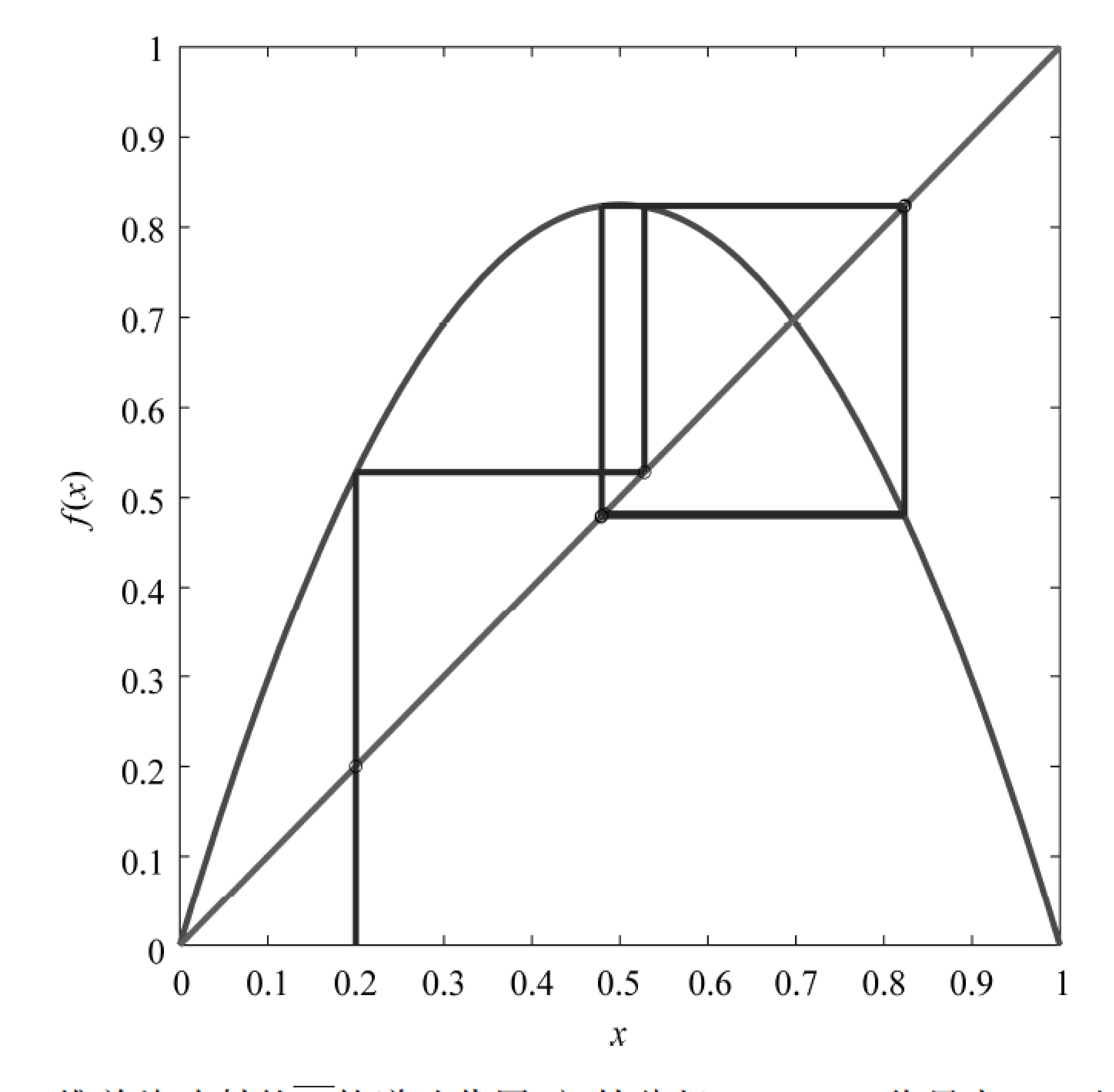


图 3.12　一维单峰映射的 $\overline{01}$ 轨道迭代图，初始猜想 $x=0.2$。临界点 0.5 左边的区间用符号 0 来标记，右边的区间用符号 1 来标记。每一条轨道都唯一对应着一段符号序列

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

010101…来描述，我们把该轨道标记为$\overline{01}$。由于这条轨道的拓扑长度为 2，它的符号序列用两个符号来表示。这样就可以用不同的符号序列来表示不同拓扑长度的周期轨道。

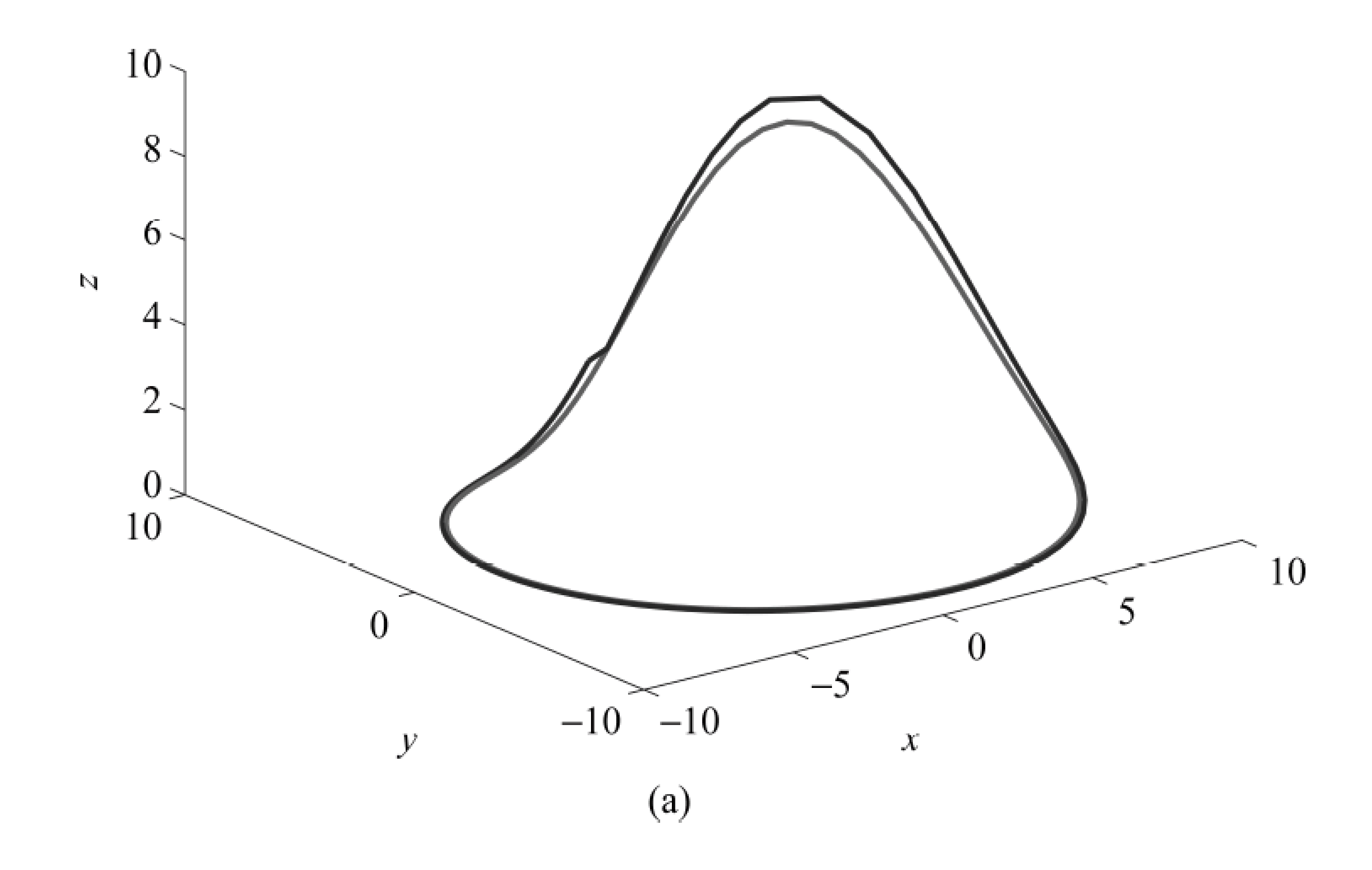
对于一维单峰映射来说，由于在区间内只有一个极值点，因此很容易建立符号动力学。遗憾的是，勒斯勒系统的回归映射是多值的[18]，很难建立一维符号动力学来系统地计算周期轨道。我们需要使用更多的符号序列来表示双峰映射，这会带来一定难度。如何在非单峰映射中有效建立符号动力学是一个开放式的问题。

3.4.3　一维符号动力学的建立

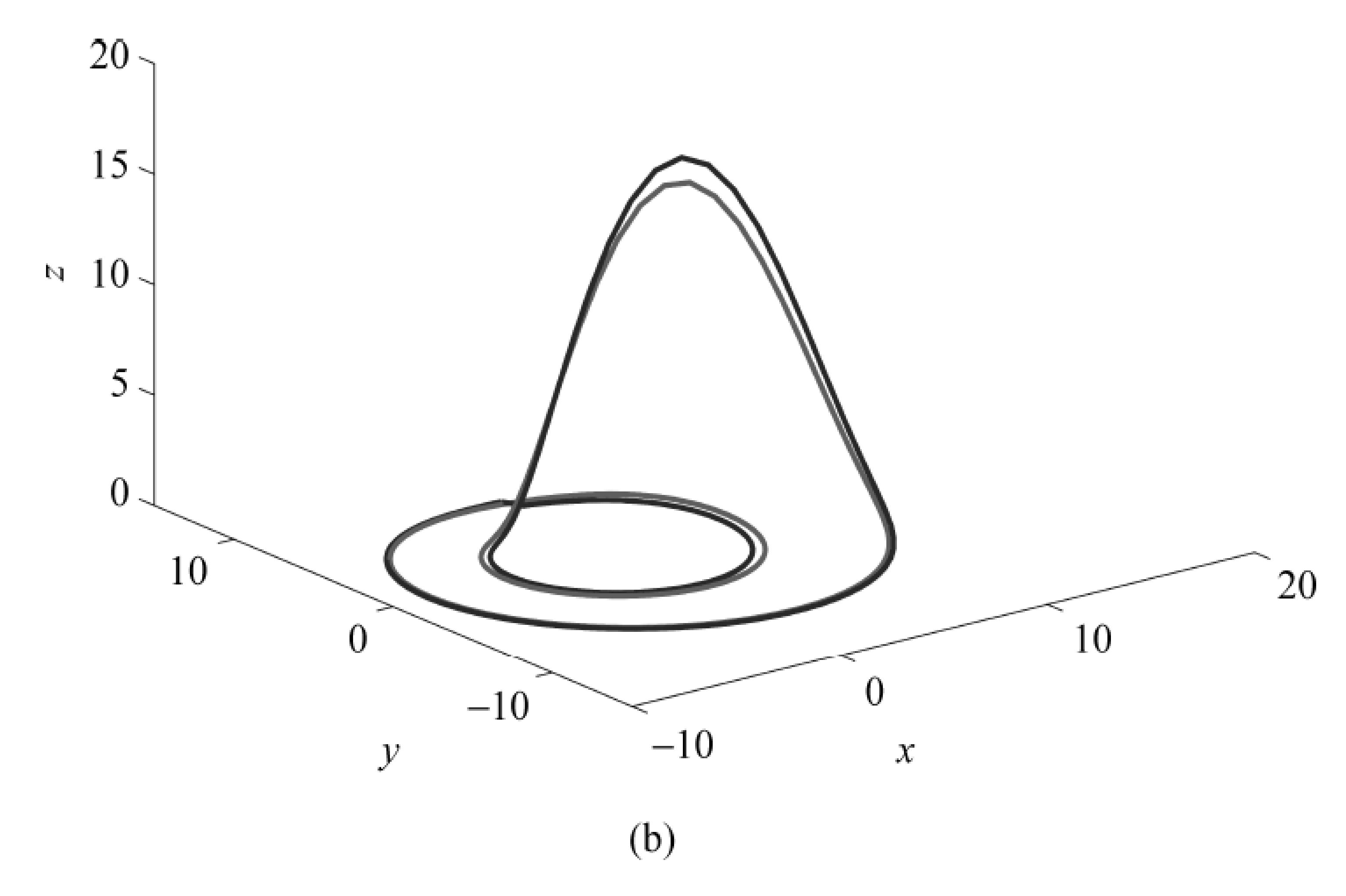
本节讨论如何利用变分法计算出勒斯勒方程在参数取 $a=b=0.2,c=5.7$ 时的所有短周期轨道。我们以两条最简单的周期轨道片段作为组成单元建立一维符号动力学，这种分类方式对勒斯勒方程非常有效，显然也可以应用到其他的复杂系统中，如洛伦兹方程。数值计算时，收敛条件是 $F^2<10^{-6}$。

经过一些尝试后，利用变分法可以计算出系统具有简单拓扑结构的周期轨道，如图 3.13 所示。轨道的初始化是这样完成的：首先对动力系统式(3-44)进行数值积分，然后找到那些接近闭合的轨道片段，并且手动连接成闭合的圈。变分法将把猜想圈逐渐修正成为系统真实的周期轨道。通过观察图 3.13 两条轨道的拓扑结构，可以建立一维符号动力学。图 3.14(a)展示了图 3.13(b)的轨道在二维平面的投影图。我们把在不动点 x^- 附近旋转的轨道片段记为符号 0，把从 z 轴折叠回 xy 平面的轨道记为符号 1。我们标记图 3.13(a)所示的轨道为 1 轨道，它有着最短的周期 $T=5.881089$。相应地，图 3.13(b)所示的轨道为 01 轨道，它的周期为 $T=11.758660$。我们发现 0 轨道并不存在，因此它被修枝掉了。

通过这种方式我们可以借助于一维符号动力学的符号序列对更长的周期轨道进行初始化。应用变分法计算旋转了多圈的复杂周期轨道时需要更精确的初始猜想，否则很可能会寻找失败。我们通过对计算出的短周期轨道进行剪切以及粘贴来作为长轨道的猜想圈，即使我们手动连接轨道片段使之闭合，变分法也通常收敛。图 3.14(b)展示了拓扑长度为 3 的 011 轨道，它由三个基本的轨道片段构成。



(a)



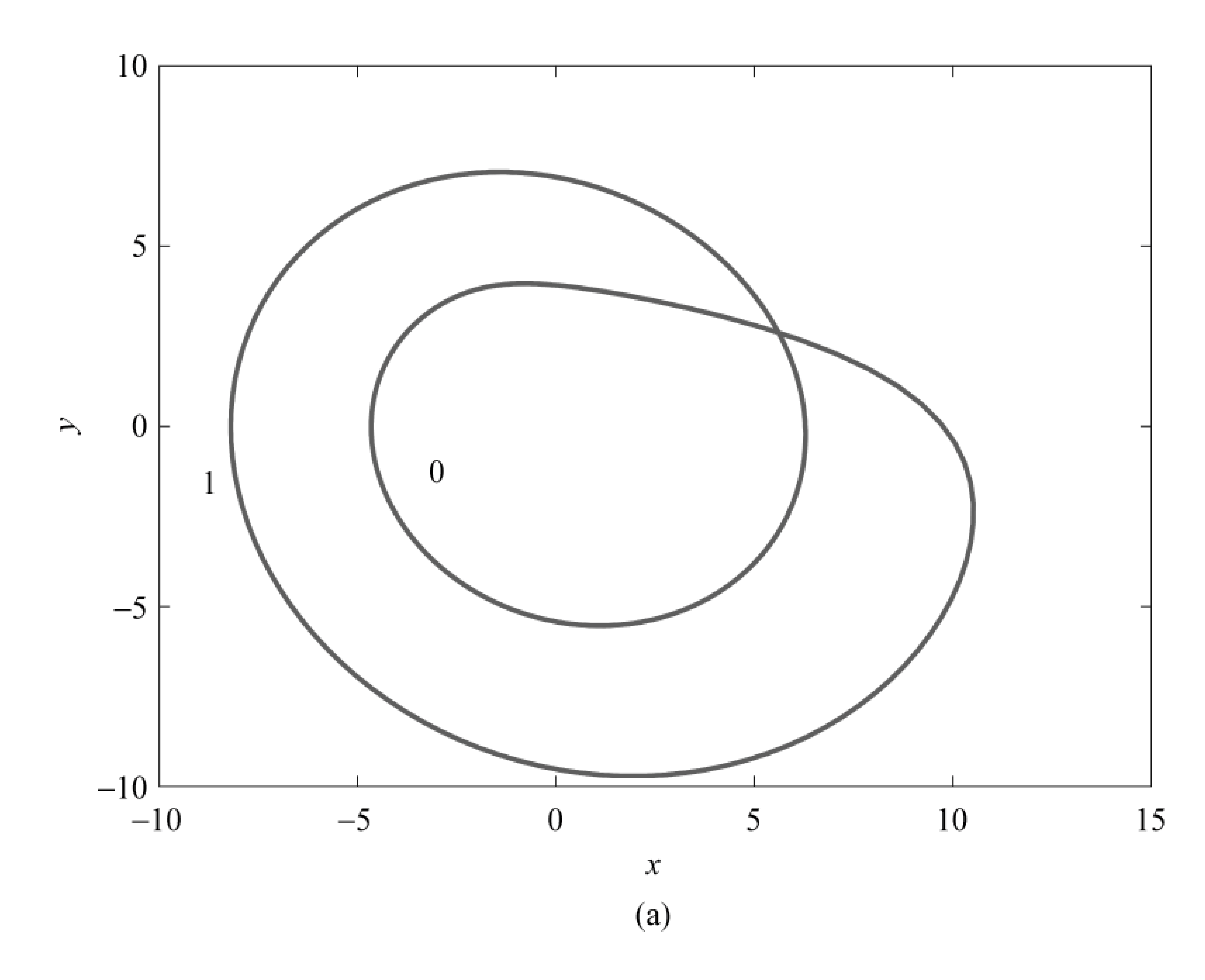
(b)

图 3.13　变分法找到的勒斯勒方程的两条周期轨道

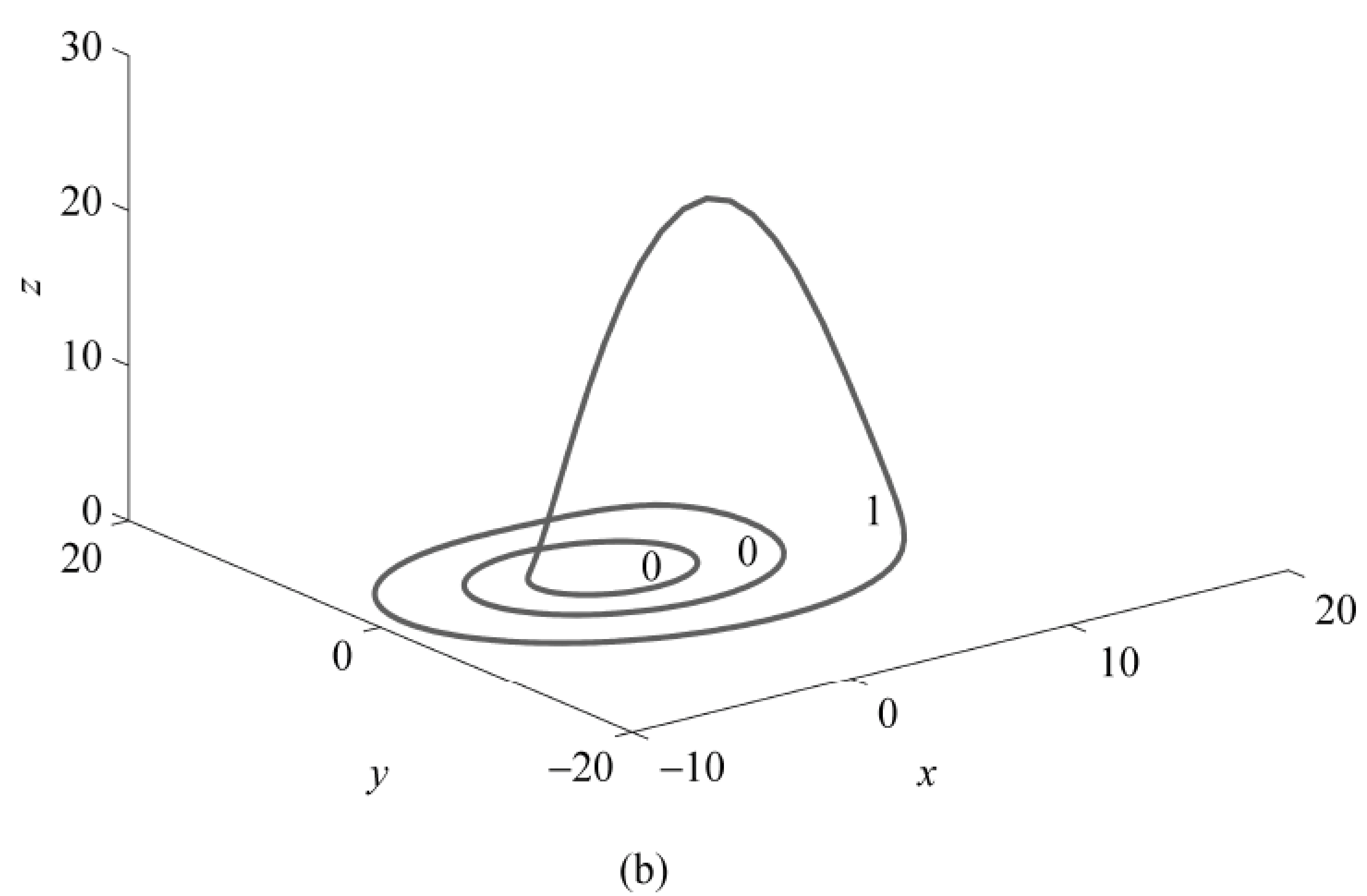
(a) 1 轨道；(b) 01 轨道。蓝线是初始猜想圈，红线是周期轨道

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

两个基本的轨道片段能被用来寻找其他复杂周期轨道的组成单元。图 3.15(a)展示了拓扑长度为 3 的 011 轨道，它是由两条 1 轨道和一条 0 轨道构成。图 3.15(b)展示了由三条 1 轨道和一条 0 轨道构成的拓扑长度为 4 的 0111 轨道。图 3.15(c)和(d)展示了拓扑长度为 5 的两条周期轨道。在一维符号动力学的帮助下，我们能够系统地找到一定拓扑长度以内的所有周期轨道：首先基于符号动力学构建初始猜想圈，利用变分法使之朝着真实的周期轨道演化，以此来验证该符号序列的周期轨道是否存在。



(a)



(b)

图 3.14　勒斯勒方程的不稳定周期轨道

(a) 周期轨道 01 的二维投影；(b) 三维空间中的 001 轨道

图上标出了轨道片段相对应的符号序列

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

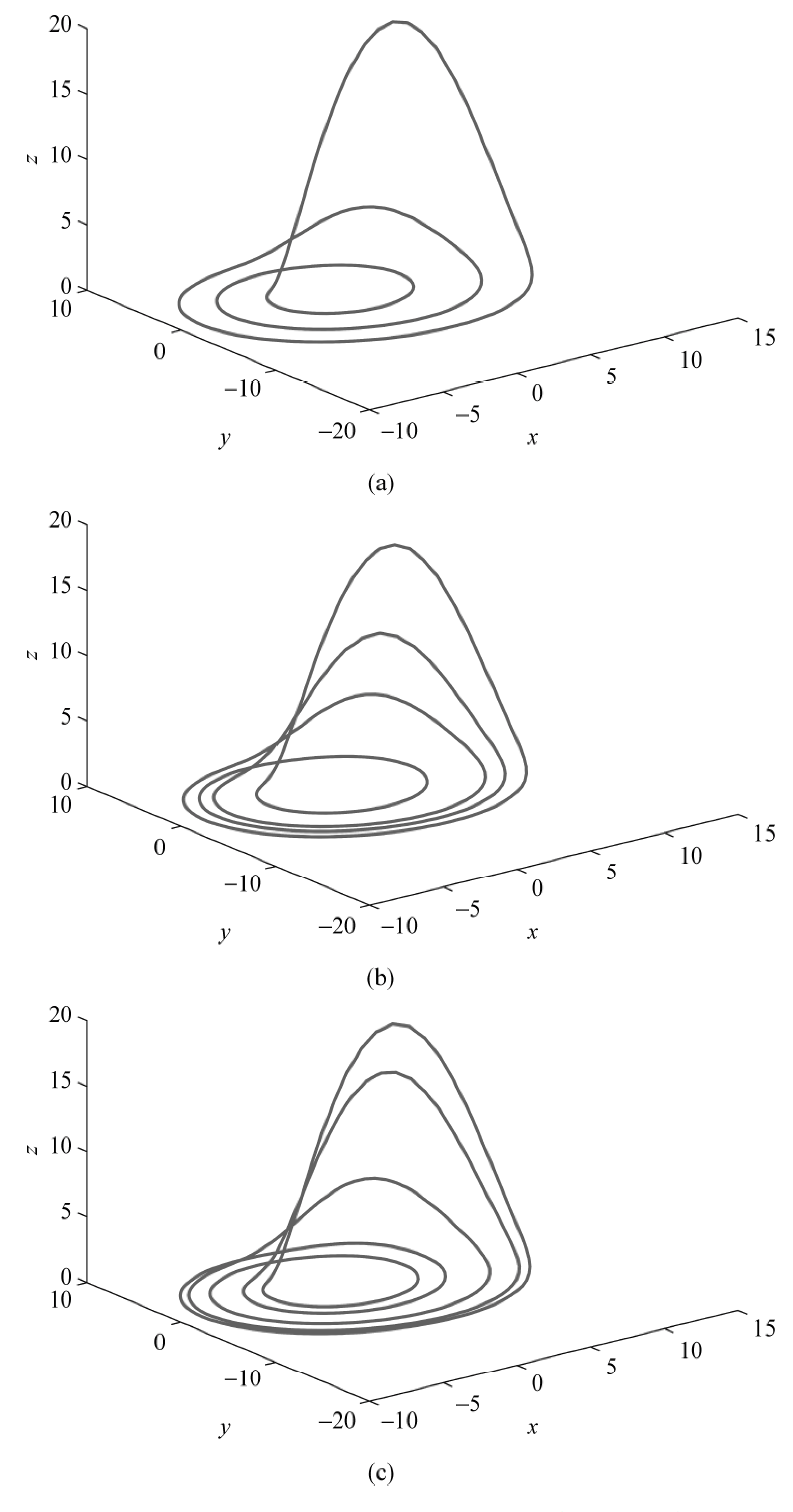
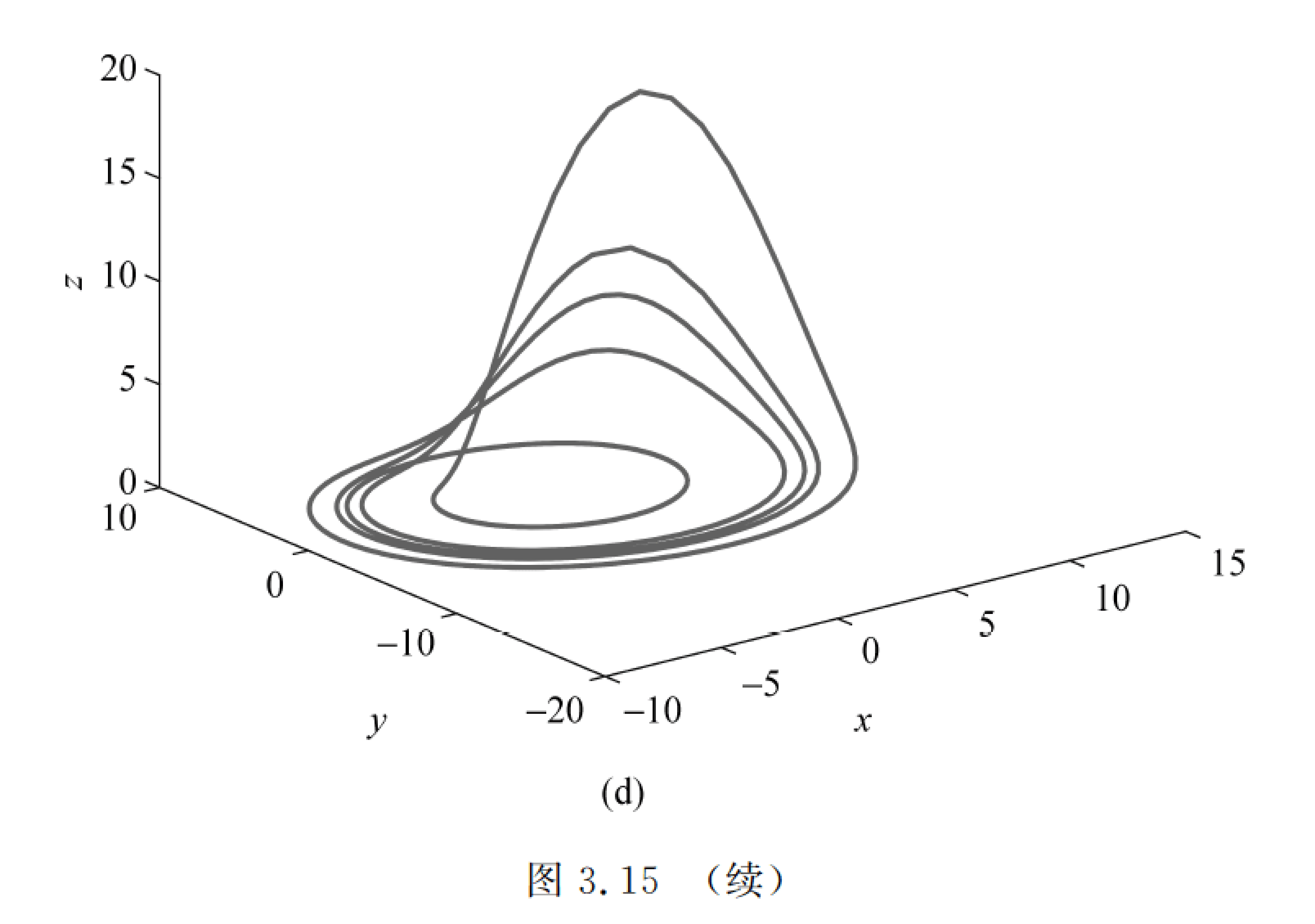


图 3.15　变分法找到的勒斯勒方程四条周期轨道

(a) 011 轨道；(b) 0111 轨道；(c) 01011 轨道；(d) 01111 轨道

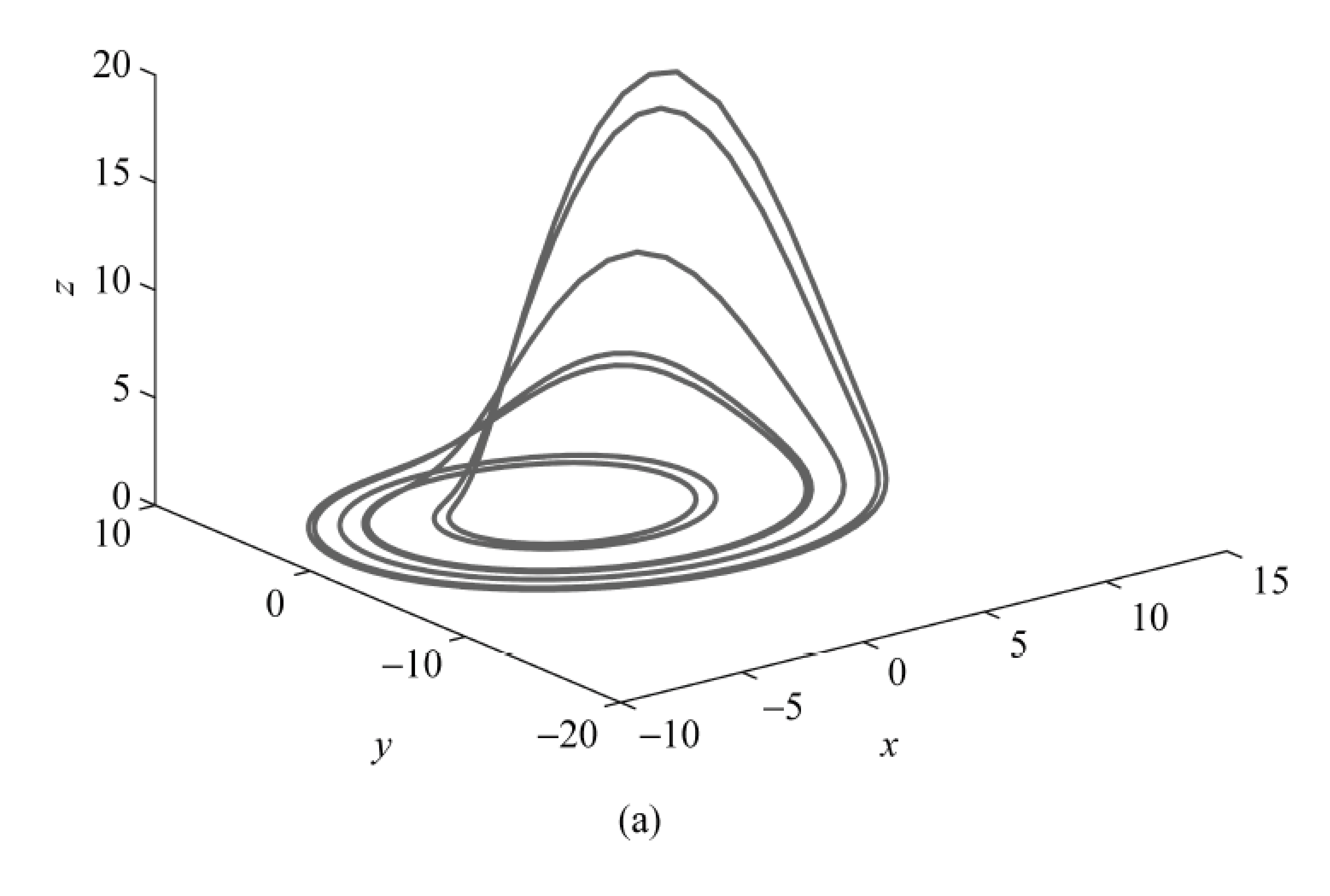
(阅读彩图请扫 158 页二维码)



(d)

图 3.15 （续）

图 3.16 展示了拓扑长度为 7 的一条复杂长周期轨道，它的符号序列为 0110111，这样的周期轨道如果没有符号动力学的帮助是很难发现的。我们发现绝大多数符号动力学允许的周期轨道实际并不存在。例如，我们没有找到 0011、00001 和 000001 等轨道。总共，我们找到了 14 条拓扑长度 7 以内的周期轨道，在表 3.1 中列出了拓扑长度 7 以内的所有周期轨道相关信息。



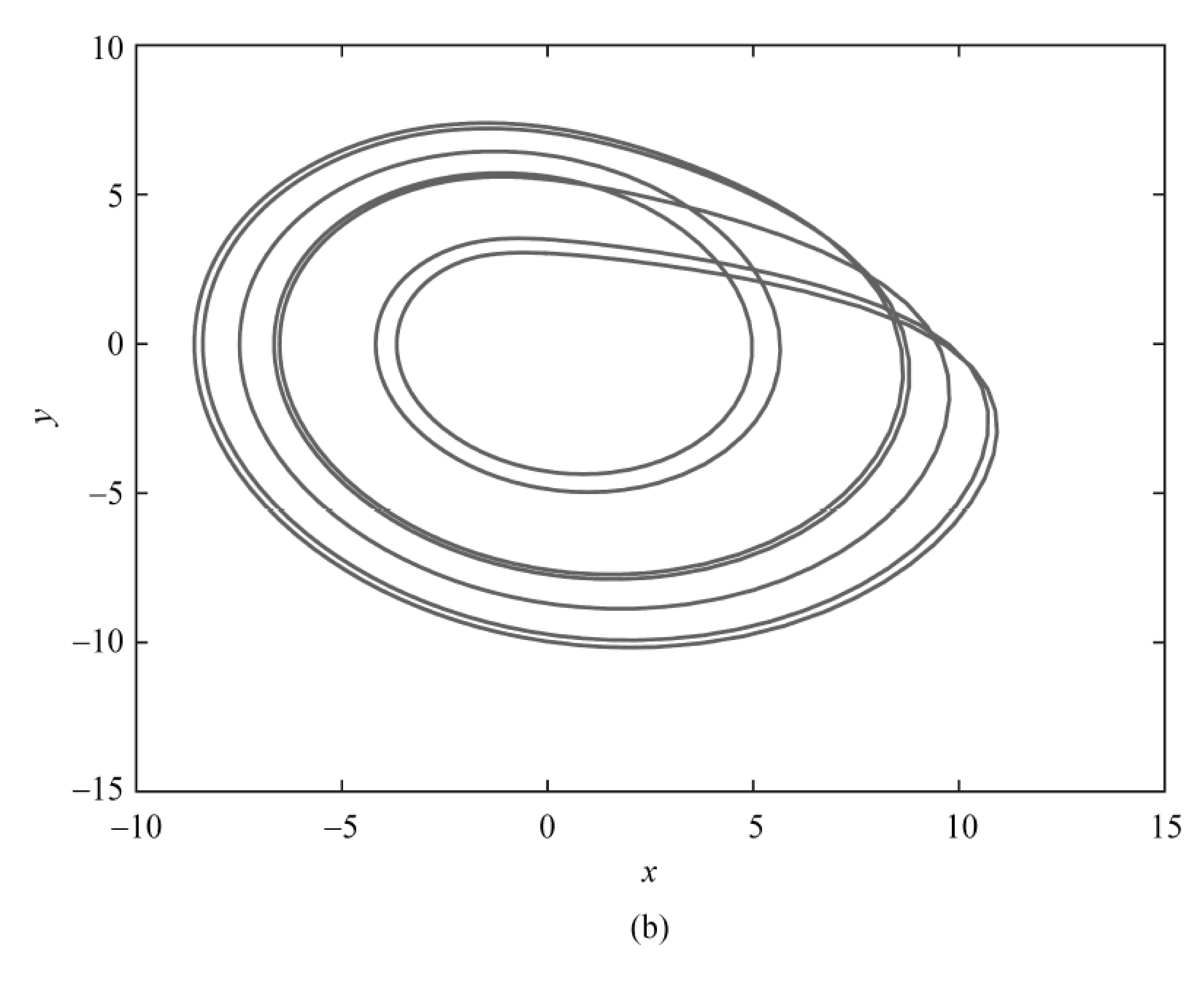
(a)

图 3.16　利用一维符号动力学，基于变分法找到的长周期轨道

(a) 拓扑长度为 7 的周期轨道，它的符号序列为 0110111，周期 $T=41.125032$；

(b) 该周期轨道在 xy 平面上的二维投影

（阅读彩图请扫 158 页二维码）



(b)

图 3.16　(续)

表 3.1　勒斯勒方程拓扑长度为 7 以内的所有周期轨道

拓扑长度	符号序列	周期	x	y	z
1	0	—	—	—	—
	1	5.881089	2.627233	−8.501714	0.043809
2	01	11.758660	2.572501	−9.686912	0.042144
3	001	17.515957	2.599422	6.590804	0.495626
	011	17.595968	1.131602	5.125206	0.069756
4	0111	23.512301	−0.062011	3.472038	4.309091
	0001	—	—	—	—
	0011	—	—	—	—
5	00001	—	—	—	—
	00011	—	—	—	—
	00101	—	—	—	—
	00111	—	—	—	—
	01011	29.365701	−1.367123	7.363490	0.050018
	01111	29.380354	0.980421	−7.793509	0.035066

续表

拓扑长度	符号序列	周期	x	y	z
6	000001	—	—	—	—
	000011	—	—	—	—
	000101	—	—	—	—
	000111	—	—	—	—
	001011	35.049184	1.744723	−3.143609	0.043655
	001101	—	—	—	—
	001111	—	—	—	—
	010111	35.266301	0.223445	−9.808221	0.029708
	011111	35.258228	1.374922	−4.776409	0.039152
7	0000001	—	—	—	—
	0000011	—	—	—	—
	0000101	—	—	—	—
	0001001	—	—	—	—
	0000111	—	—	—	—
	0001011	—	—	—	—
	0001101	—	—	—	—
	0010011	—	—	—	—
	0010101	—	—	—	—
	0001111	—	—	—	—
	0010111	—	—	—	—
	0011011	—	—	—	—
	0011101	—	—	—	—
	0101011	41.122199	0.018513	7.228308	0.095524
	0011111	—	—	—	—
	0101111	41.135866	0.437013	5.918316	0.062522
	0110111	41.125032	0.523892	−8.385808	0.031755
	0111111	41.142492	0.012064	3.326099	4.828461

注：表中列出了这些轨道的拓扑长度、符号序列、周期以及周期轨道上一点的坐标(x,y,z)，注意到有很多条周期轨道并不存在，我们用符号“—”来标记。

本节应用变分法研究了勒斯勒方程的周期轨道。由于回归映射的多值性,基于轨道的拓扑结构可以成功建立一维符号动力学。我们以两个基本的轨道片段作为组成单元,据此构建初始猜想圈,使得系统一定拓扑长度内的所有周期轨道都能够找齐。勒斯勒系统的动力学平均,例如逃逸率等各个量都可以利用周期轨道理论的轨道展开进行计算,这在分析系统的动力学行为时很有用。

对于勒斯勒方程而言,仍然有许多动力学行为还不清楚,例如体系的连接轨道。基于轨道的拓扑建立符号动力学或许可以系统地分类连接轨道以及分析彼此之间的关系。系统随着参数变化时的各种分岔性质也值得深入讨论,变分法也许能够解决这一问题。利用轨道的同伦演化可以追溯轨道的连续形变,这可以帮助我们分析轨道在参数改变时所存在的范围。

3.5　小结与讨论

这一章我们介绍了几种数值计算周期轨道的方法。为了克服高维态空间里寻找不稳定周期轨道的困难,我们重点介绍了变分法,它使用无穷小变步长的阻尼牛顿迭代法。本章的主要结果是偏微分方程式(3-25),它解决了成本函数最小化的变分问题,这个方程使得成本函数始终以指数的速度减小。我们也详细介绍了如何在数值上计算这个偏微分方程,并分别对两个典型的非线性混沌体系进行了成功的应用。变分法包含了相空间中大量点的信息以及所要找的周期轨道的全局拓扑结构,始终保持圈的光滑性和对其进行均匀离散化取点,该方法在实践中具有很好的鲁棒性。我们也分别以保守系统和耗散系统为例,应用变分法计算了周期轨道。

我们目前还不清楚对于一个给定的动力系统流和一个给定的初始圈猜想,应用式(3-25)后圈会演变成什么。以经验来讲,会向着离它最近的周期轨道演化,同时保持最大程度的拓扑相似性。我们也看到,可以将变分法找到的短不稳定周期轨道作为基本的组成单元,以此来系统地研究混沌系统的不稳定周期轨道。

值得注意的是,尽管在这里我们只是研究如何寻找周期轨道,但是变分法是一种普适的方法,它也可以用来计算混沌体系的不变环[83]。本书第 6 章将会讨论,通过适当的修改点的分布以及边界条件,变分法也可以用来计算非线性动力系统中连接同一个不动点的同宿轨道以及不同不动点间的异宿轨道。

第 4 章　Kuramoto-Sivashinsky 方程的周期轨道

本章将系统研究 Kuramoto-Sivashinsky 方程（KS 方程）的周期轨道。为了克服在此混沌系统中建立一维符号动力学的困难，两条周期轨道被当成组成单元用来初始化圈猜想，我们用变分法数值计算了参数 $\nu=0.02991$ 时的所有短周期轨道。在相空间中基于轨道的拓扑建立一维符号动力学来分类 KS 方程的周期轨道，这种方式是很成功的，当前的方法也可以用于其他混沌系统周期轨道的计算与分类。

4.1　背景介绍

近些年来随着科技的发展动力系统受到了广泛关注，在数学、物理以及工程上有着越来越多的应用[84]。对于非线性物理系统来说，周期轨道由于拓扑不变性等性质，在分析动力系统时起着重要的作用。此外，震荡的产生与变化也同周期轨道密切相关，因此捕获混沌系统的周期轨道可以帮助我们有效分析系统的动力学性质。人们针对 KS 方程做了大量的研究工作[85,86]。文献[87]研究了鞍点在高维动力系统的混沌暂态中所起的作用，作者把类似的方法用到了 KS 方程上。尼克尔分析了 KS 方程的行波解，它可以通过魏尔斯特拉斯（Weierstrass）函数的形式来表达[88]。在文献[89]里，作者研究了一维 KS 方程的初始边界值问题，证明了 KS 方程全局解的存在性。

近来人们利用计算机研究了 KS 方程周期轨道的数值解以及存在性。在对称约化的态空间里，文献[90]研究了 KS 方程相对周期轨道的不稳定流形，他们提出了一种新的方法用来约化方程的 O(2)对称性。文献[91]讨论了 KS 方程不变环的存在性以及稳定周期解的渐近行为，提出利用分岔理论进行研究。一个最新的工作关注于周期条件下一维 KS 方程的动态转变[92]。在文

献[93]里,作者通过对覆盖在吸引子上的不稳定周期轨道进行分类,重构了 KS 方程的混沌鞍点。文献[94]和文献[95]系统地研究了 KS 方程稳态解的周期轨道,我们将在第 5 章进行讨论。

本章内容安排如下：4.2 节介绍 KS 方程及其动力学性质,它可以用无穷阶耦合的常微分方程来表示;4.3 节讨论如何建立符号动力学来系统分类 KS 方程的周期轨道,这在组织态空间动力学的全局拓扑上起着至关重要的作用;4.4 节里我们对本章内容做一小结。

4.2 Kuramoto-Sivashinsky 方程简介

KS 方程最初是 20 世纪 70 年代由 Kuramoto 和 Tsuzuki 在进行角相位湍流模拟以及热扩散不稳定性的研究时提出来的[96],Sivashinsky 研究火焰在喷射发动机燃烧腔中的传播时也独立提出了这一方程[97]。KS 方程是描述空间延展系统振动函数缓慢变化的内禀相位方程。该方程也可以用来描述其他的物理过程,例如,流体在斜面上的波前运动[98,99]、等离子体中不稳定的漂移波[100,101]、两个并发黏滞流体间的界面不稳定性[102]等。方程的形式是：

$$u_t = (u^2)_x - u_{xx} - \nu u_{xxxx} \tag{4-1}$$

下角标 x 和 t 分别表示对 x 和 t 的偏微分。这里时间 $t \geqslant 0$,空间坐标 $x \in [0, 2\pi]$,ν 是一个四阶黏滞阻尼参数,用来控制系统的耗散率。我们看到方程的右边有三项：第一项是非线性的对流项,它引起了不同大小的傅里叶模之间的相互作用,一般来说使得能量从低波数的模传输到了高波数的模上;第二项是反耗散项,为系统提供能量使之处于不稳定;最后一项是能量耗散项,使系统处于稳定。

我们之所以要研究这个偏微分方程,是因为一维 KS 方程是一个可以展示时空混沌特性的最简单的偏微分方程。此体系中,能量由较大尺度输入,通过非线性耦合,传输到小尺度耗散掉。所以 KS 方程在不同参数下表现出复杂程度各异的不同动力学斑图,是研究斑图形成和时空混沌的重要模型。戈伦等最初通过截断 KS 方程的两个不稳定的模来研究它的不稳定周期解[103],后面我们会看到,甚至在混沌区,可以通过有限个常微分方程来近似估计它的渐近动力学行为。

我们假定函数 $u(x,t)=u(x+2\pi,t)$ 在 $x\in[0,2\pi]$ 上是周期的。对于这样的周期函数，标准做法是把它展开成一系列离散的空间傅里叶模：

$$u(x,t)=\sum_{k=-\infty}^{\infty}b_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \tag{4-2}$$

因为 $u(x,t)$ 是实的，

$$b_k=b_{-k}^{*} \tag{4-3}$$

把式(4-2)代入式(4-1)，左边变成了

$$u_t(x,t)=\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}=\sum_{k=-\infty}^{\infty}\dot{b}_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

右边的三项分别变成

$$\begin{aligned}
(u^2)_x&=\Big[\Big(\sum_{k=-\infty}^{\infty}b_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\Big)\Big(\sum_{k=-\infty}^{\infty}b_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\Big)\Big]_x\\
&=\Big(\sum_{k,j}b_kb_j\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+j)x}\Big)_x\\
&=\sum_{k,j}\mathrm{i}(k+j)b_kb_j\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+j)x}\\
&=\sum_{m=-\infty}^{\infty}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}b_mb_{k-m}\\
-u_{xx}&=\sum_{k=-\infty}^{\infty}k^2b_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\\
-\nu u_{xxxx}&=-\nu\sum_{k=-\infty}^{\infty}k^4b_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}
\end{aligned}$$

所以有

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty}\dot{b}_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}=\sum_{m=-\infty}^{\infty}\sum_{k=-\infty}^{\infty}\mathrm{i}k\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}b_mb_{k-m}+\sum_{k=-\infty}^{\infty}k^2b_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\nu\sum_{k=-\infty}^{\infty}k^4b_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \tag{4-4}$$

可以得到关于傅里叶系数 b_k 的无穷阶常微分方程：

$$\dot{b}_k=(k^2-\nu k^4)b_k+\mathrm{i}k\sum_{m=-\infty}^{\infty}b_mb_{k-m} \tag{4-5}$$

由于 $\dot{b}_0=0$，解的平均值是运动的积分。我们假设这个平均值是 0，即 $\int u(x,t)\mathrm{d}x=0$。系数 b_k 一般情况下是时间的复函数，我们假定 b_k 是纯虚数来简化系统方程(4-5)，令 $b_k=\mathrm{i}a_k$，其中 a_k 是实的。式(4-5)变为

$$\dot{a}_k=(k^2-\nu k^4)a_k-k\sum_{m=-\infty}^{\infty}a_ma_{k-m} \tag{4-6}$$

由式(4-3)可得 $\mathrm{i}a_k=-\mathrm{i}a_{-k}$，即 $a_k=-a_{-k}$。

$$-u(-x,t)=-\sum_{k=-\infty}^{\infty}b_k(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}=-\sum_{k=-\infty}^{\infty}\mathrm{i}a_k(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

$$=\sum_{k=-\infty}^{\infty}\mathrm{i}a_{-k}(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}=\sum_{k=-\infty}^{\infty}\mathrm{i}a_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}=u(x,t)$$

这意味着我们只取奇数解的子空间 $u(-x,t)=-u(x,t)$。由式(4-6)可以得到

$$A_{kj}(a)=\frac{\partial v_k(x)}{\partial a_j}=\frac{\partial}{\partial a_j}\left[(k^2-\nu k^4)a_k-k\sum_{m=-\infty}^{\infty}a_m a_{k-m}\right] \tag{4-7}$$

当 $j=k$ 时，等式右边的第一项得以保留下来，当 $j=m$ 或 $j=k-m$ 时，第二项保留。我们可以把式(4-7)写成下面的形式：

$$A_{kj}(a)=(k^2-\nu k^4)\delta_{kj}-2ka_{k-j} \tag{4-8}$$

当 $u(x,t)=0$ 时，a_{k-j} 项消失，因此雅可比矩阵的元素

$$\boldsymbol{J}^t(0)_{kj}=\mathrm{e}^{(k^2-\nu k^4)t}\delta_{kj} \tag{4-9}$$

我们有

$$\boldsymbol{a}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}(t)}\boldsymbol{a}(0)=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{(k^2-\nu k^4)t} & \cdots & 0\\ \vdots & & \vdots\\ 0 & \cdots & \mathrm{e}^{(k^2-\nu k^4)t}\end{pmatrix}\boldsymbol{a}(0) \tag{4-10}$$

当 $|k|<1/\sqrt{\nu}$ 时，$(k^2-\nu k^4)>0$，小的扰动会使上面的矩阵偏离它的本征方向，这些不动点的长波模是线性不稳定的，而 $|k|>1/\sqrt{\nu}$ 的短波模是线性稳定的。当 $\nu>1$ 时，$u(x,t)=0$ 是整体吸引的稳定不动点[104]。当 $\nu<1$ 时，系统开始经历一系列的分岔[105]。我们选择 $\sqrt{\nu}$ 足够小，这时的动力学是时空混沌的，但是又不能取得太小，否则为了保持精度就需要取很多短波长的模。

4.3　拓扑的方式分类 KS 方程的周期轨道

4.3.1　傅里叶模截断

计算机进行模拟时，需要对无穷阶的常微分方程式(4-6)进行截断，保留有限项 N，当 $k>N$ 时，$a_k=0$。N 不能取得太小否则会影响精度，也不能取得太大，这会导致计算量的增加。N 值每增加一次系统就发生了一次小的扰

动，通常会使系统的性质发生显著变化。通过计算发现，只有当 $N>9$ 时系统才会产生混沌行为，但是如果只取 $N=9$ 截断会使系统变得和完整的动力系统性质很不一样。所以后来又分别取了 $N=15$、16 和 17 进行计算，发现系统在这几处截断后的性质差别不大。最终我们选择取 $N=16$ 的截断，此时的精度已经足够好了。

在这样的 16 维空间中，动力系统的轨道是很难想象出来的，我们可以把轨道投影到任意的一个三维子空间里去，图 4.1 展示了参数 $\nu=0.02991$ 时用四阶龙格-库塔法演化式(4-6)得到的吸引子图像，从图 4.1 可以看到它是由无数条周期轨道稠密覆盖的。为了分析这样的高维动力系统通常需要选取一个合适的庞加莱截面，接下来介绍庞加莱截面的相关数学概念。

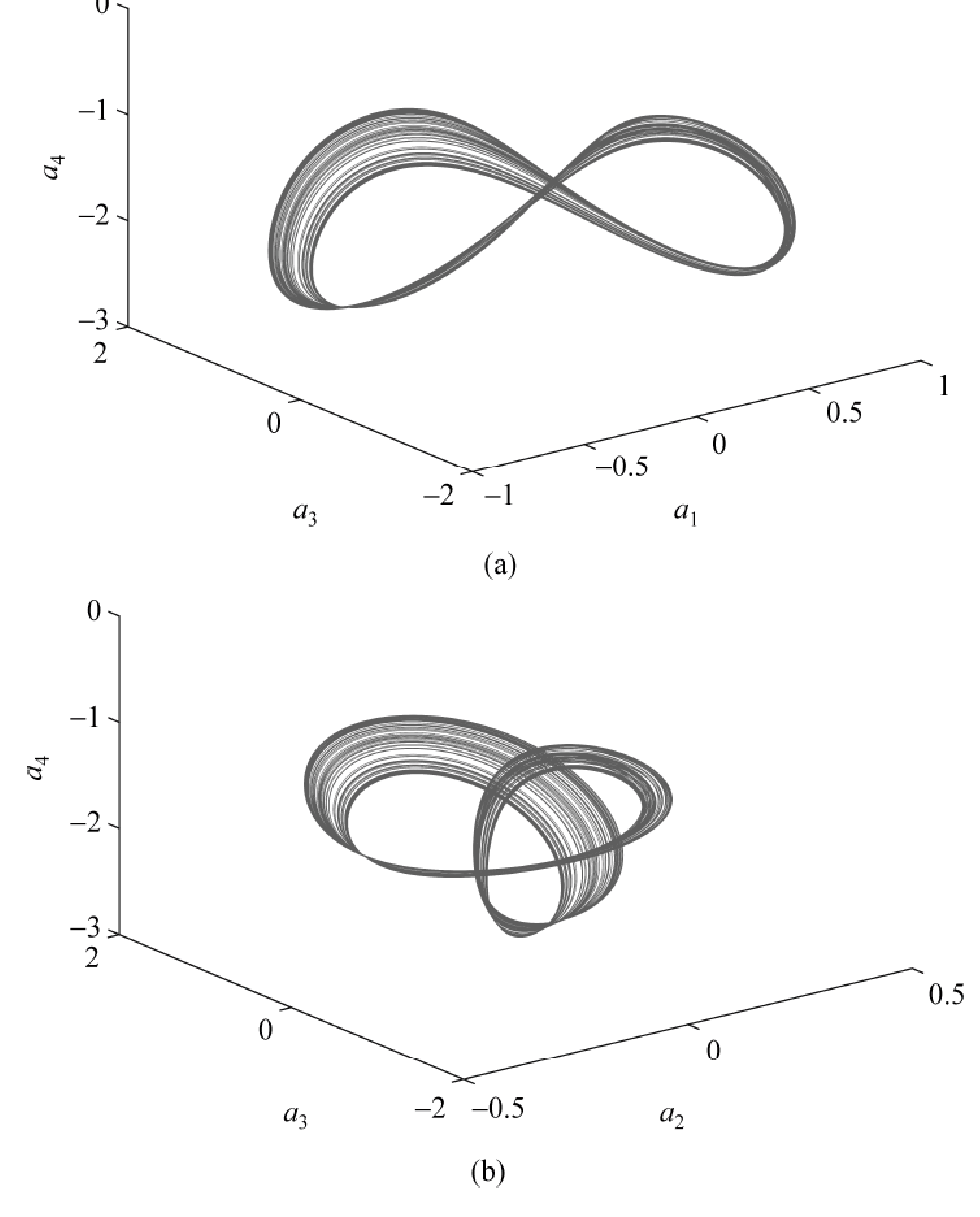


图 4.1　KS 方程投影到不同的三维子空间的吸引子图像

(a) $\{a_1, a_3, a_4\}$；(b) $\{a_2, a_3, a_4\}$。$N=16, \nu=0.02991$

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

4.3.2　庞加莱截面

数学上，在 n 维相空间中，取一个或一组 $n-1$ 维的超平面$\mathcal{P}$，称为庞加莱截面。轨道不断地和庞加莱截面相交，相交点是$\{\boldsymbol{x}_0,\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_k,\boldsymbol{x}_{k+1},\cdots\}$，这定义了庞加莱映射。庞加莱映射是一个 $n-1$ 维的映射

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}_k) \tag{4-11}$$

其中 $\boldsymbol{x}_k,\boldsymbol{x}_{k+1}\in\mathcal{P}$。庞加莱截面的选取是任意的，要定义一个与所有轨道相交的截面是很困难的，我们通常关心的是局域的性质。庞加莱截面可以用一个函数来定义：

$$\boldsymbol{x} \in \mathcal{P},\quad \text{如果}\ U(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{4-12}$$

通常要求轨道是穿过庞加莱截面的，而不是与之相切。在截面上，$\boldsymbol{x}$ 旁边的点 $\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x}$ 满足 $U(\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x})=0$，在轨道上，$\delta\boldsymbol{x}=\boldsymbol{v}\delta t$。所以轨道穿过截面的条件为

$$\begin{cases}(\boldsymbol{v}\cdot\partial U) = \sum\limits_{j=1}^{n} v_j(\boldsymbol{x})\partial_j U(\boldsymbol{x}) \neq 0, \\ \partial_j U(\boldsymbol{x}) = \dfrac{\partial}{\partial x_j}U(\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{x}\in\mathcal{P}\end{cases} \tag{4-13}$$

因此，庞加莱映射可以写成另一种形式

$$\begin{gathered}\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{P}(\boldsymbol{x}_k),\quad U(\boldsymbol{x}_{n+1}) = U(\boldsymbol{x}_n) = 0,\quad n\in\mathbf{Z}^+ \\ \sum_{j=1}^{n} v_j(\boldsymbol{x}_n)\partial_j U(\boldsymbol{x}_n) > 0\end{gathered} \tag{4-14}$$

若 $\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{x}_k$，则 $\boldsymbol{x}_k$ 是庞加莱映射的不动点，也就是原来系统周期轨道上的点。从图 4.2 可以看到，庞加莱映射很好地将微分方程系统与迭代映射联系在了一起，而周期轨道则和不动点有着密切的联系[18]。

图 4.3 展示了庞加莱映射的分岔图。为了得到该图，我们随意选择初始点，迭代一段时间使之落到吸引子上，然后画出 a_9 坐标和截面接下来的 5000 次交点。对于不同的阻尼参数 ν，重复上面的过程即可。从图 4.3 可以看出，取不同 ν 值时系统的动力学行为很不一样，如奇怪吸引子、周期窗口、稳定极限环等。本章研究阻尼参数 $\nu=0.02991$，此时系统是混沌的。

对于 KS 方程，观察通过图 4.1，我们选取 $a_1=0$ 作为庞加莱截面。我们以初始条件 $a_1=0$，其他坐标任意，演化式(4-6)。当 a_1 下一次变成 0 的时候，坐标 $a_2,\cdots,a_N$ 被映射成$(a'_2,\cdots,a'_N)=P(a_2,\cdots,a_N)$，$P$ 为庞加莱映射。

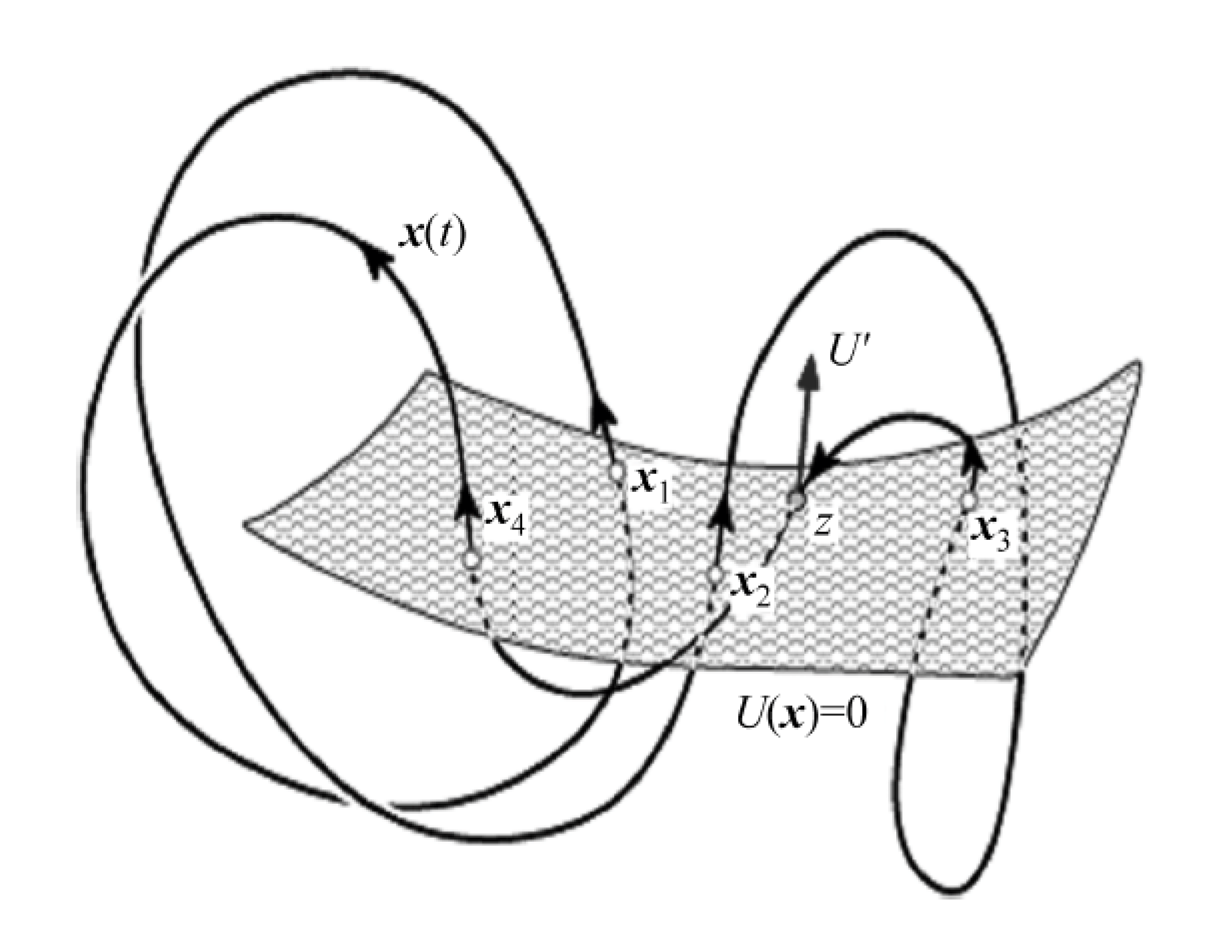


图 4.2　一条轨道 $\boldsymbol{x}(t)$ 与庞加莱截面在 t_1、t_2、t_3、t_4 时刻相交，形成一条拓扑长度为 4 的周期轨道($\boldsymbol{x}_1$,$\boldsymbol{x}_2$,$\boldsymbol{x}_3$,$\boldsymbol{x}_4$),$\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{x}(t_k)$ 注意到轨道经过 z 处时,由于流的方向性原因,并没有被考虑进去[18]

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

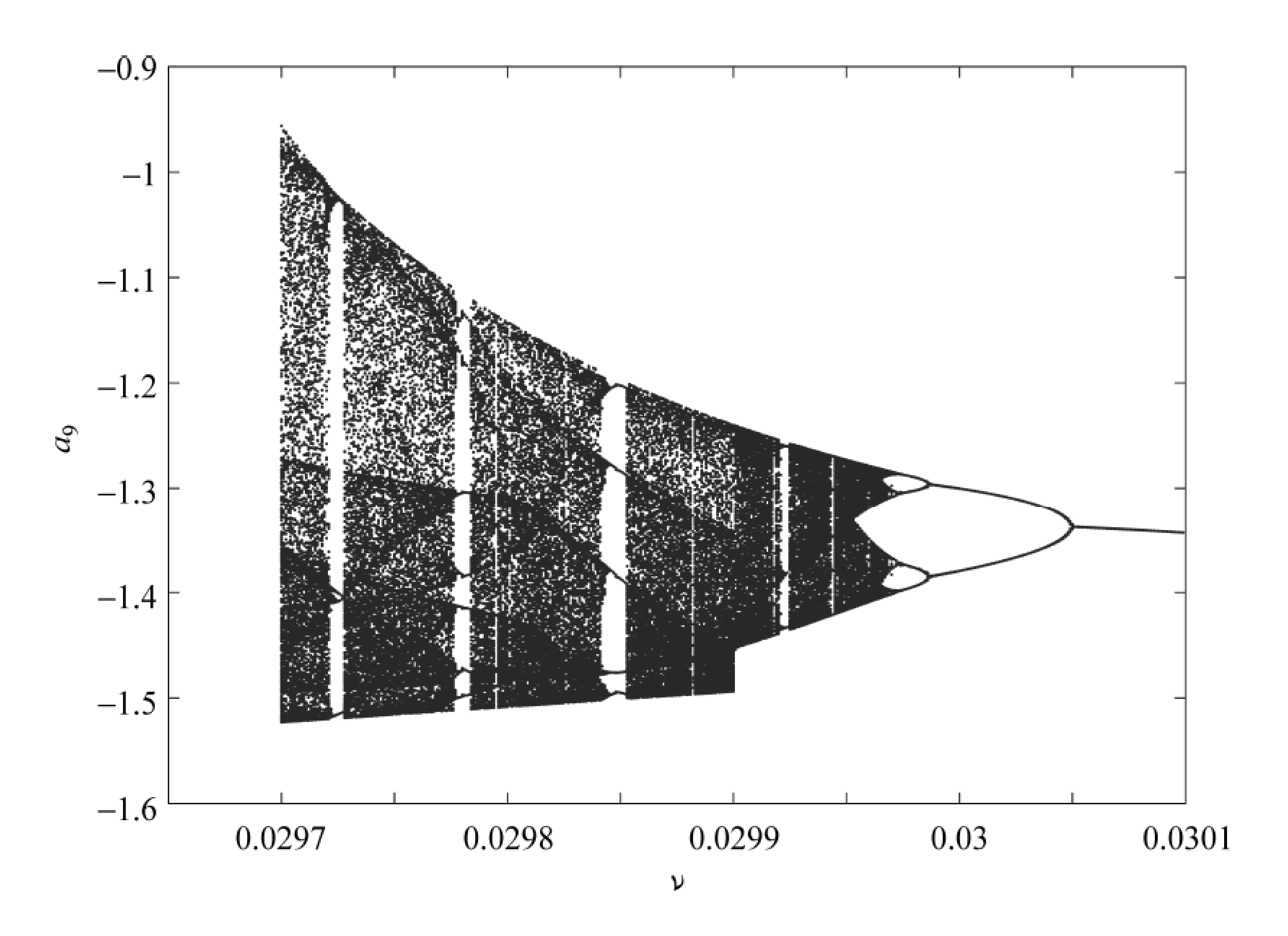


图 4.3　a_9 坐标的分岔图,16 个傅里叶模截断。我们选取 $\nu=0.02991$ 进行研究,此时系统是混沌的

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

图 4.4 展示了不同坐标的庞加莱映射图，可以看到 a_9 和 a_{16} 坐标的映射都是多值的。为了能够将所有的短周期轨道找齐，我们需要建立合适的符号动力学。

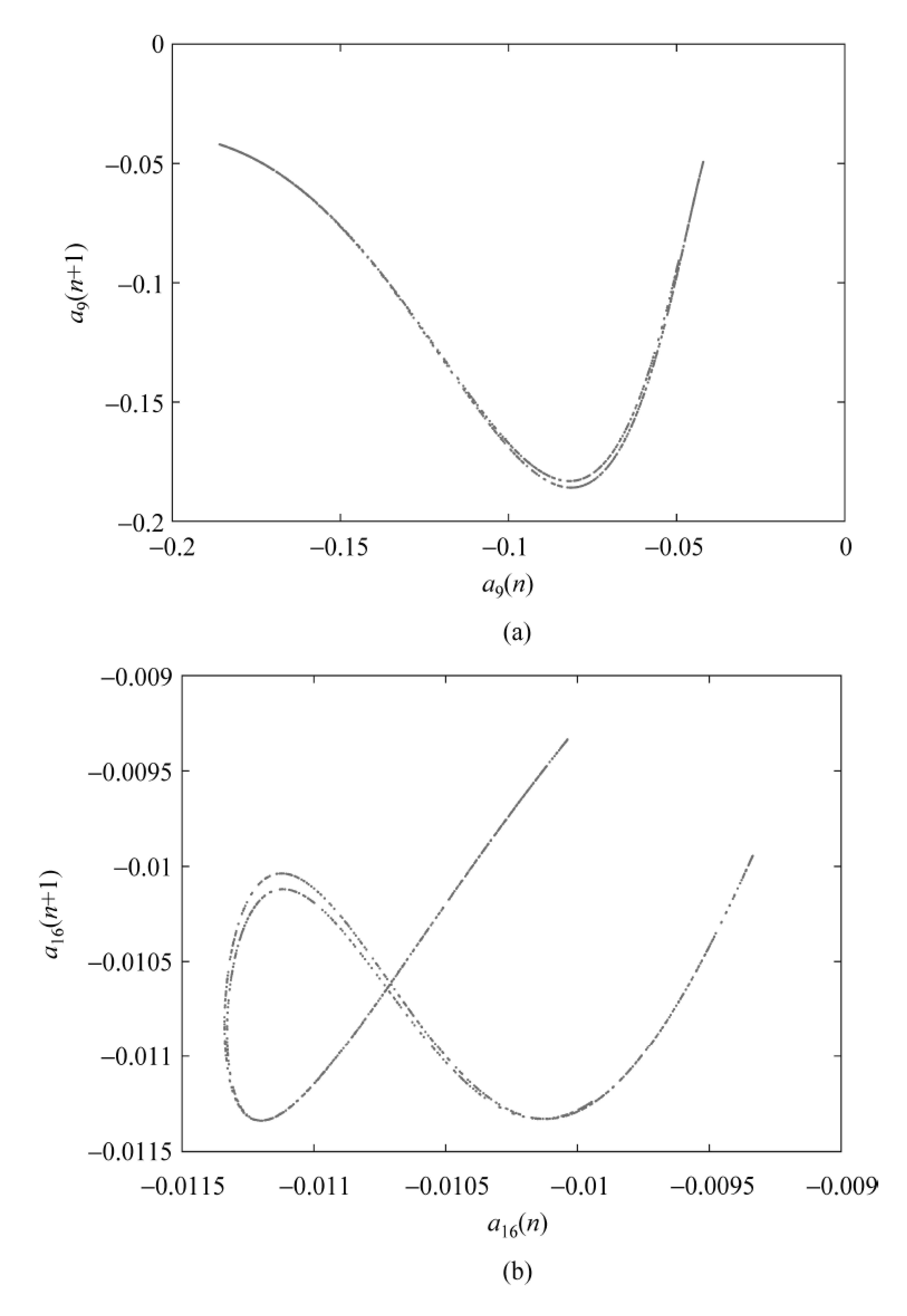


图 4.4　庞加莱截面回归映射图。可以看到 a_9 和 a_{16} 坐标的回归映射都是多值的

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

对于著名的洛伦兹方程，图 4.5 展示了它的吸引子的二维投影以及回归映射图，从图 4.5(b)中可以看出该回归映射几乎是一维的，可以方便地建立

符号动力学找出系统所有短的不稳定周期轨道[106-108]。但是从图 4.4 中我们看到，KS 方程的回归映射并不是单峰的，传统的建立一维符号动力学的方法在这里并不适用。

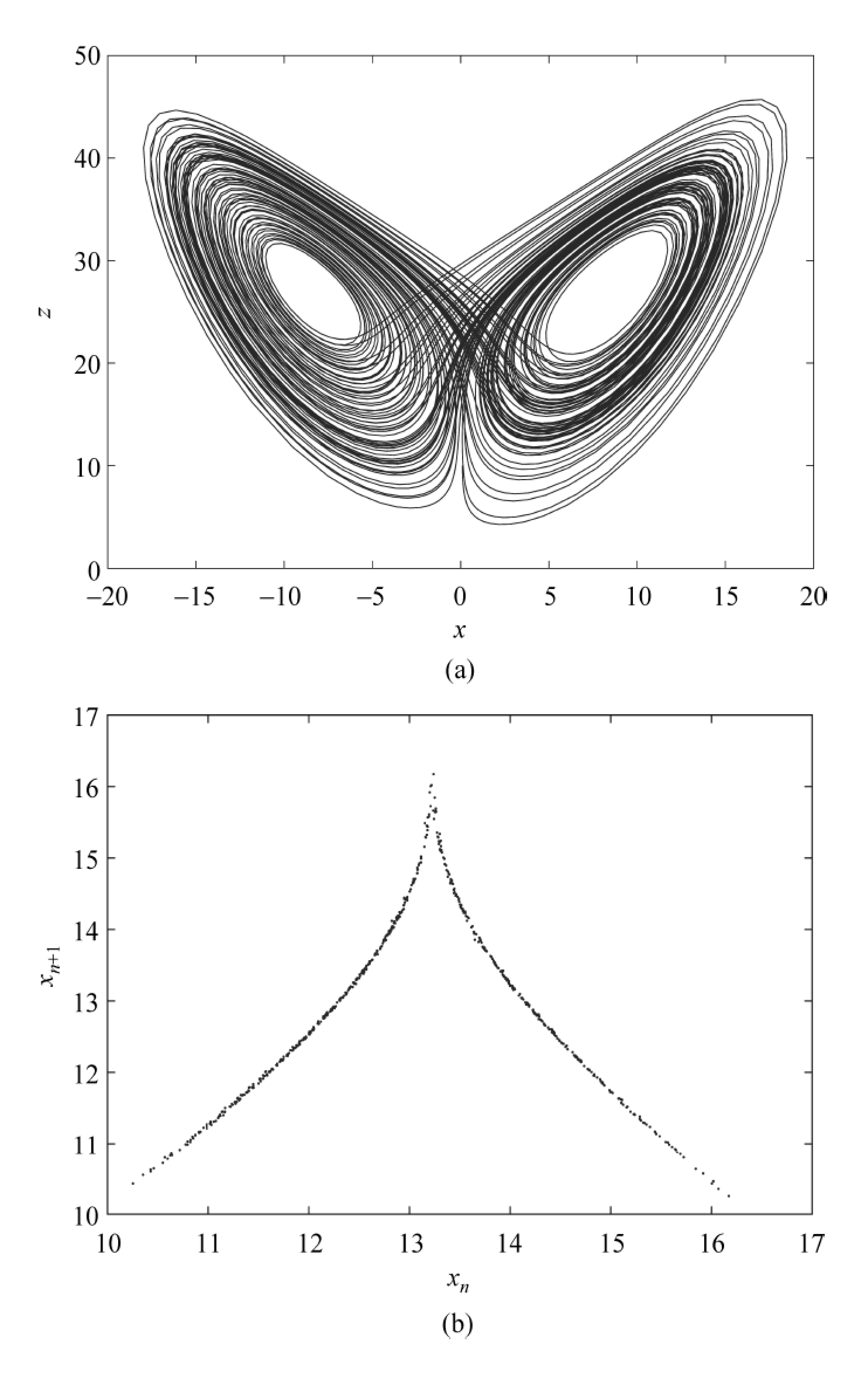


图 4.5　洛伦兹方程的吸引子和回归映射图

(a) 洛伦兹方程的吸引子在 xz 平面上的二维投影；

(b) 庞加莱截面 $z=27$ 时，x 坐标的一维回归映射

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

4.3.3　KS 方程周期轨道的数值计算

本节具体讨论如何利用变分法找到 $\nu=0.02991$ 时 KS 方程所有的短周期轨道。该方法在此系统中很有效，显然可以用于 KS 方程其他参数值时的情况。首先对 KS 方程进行长时间的数值积分，以此看出轨道在态空间里何处比较集中。我们找到一条接近闭合的轨道，通过快速傅里叶变换变成波数表示，去掉高频模，逆快速傅里叶变换到态空间就得到了光滑的周期轨道，这样完成了初始猜想圈的建立。图 4.6 展示了其中一条周期轨道。通过对轨道进行初始猜想，变分法把猜想圈修正成了系统中真实的周期轨道。

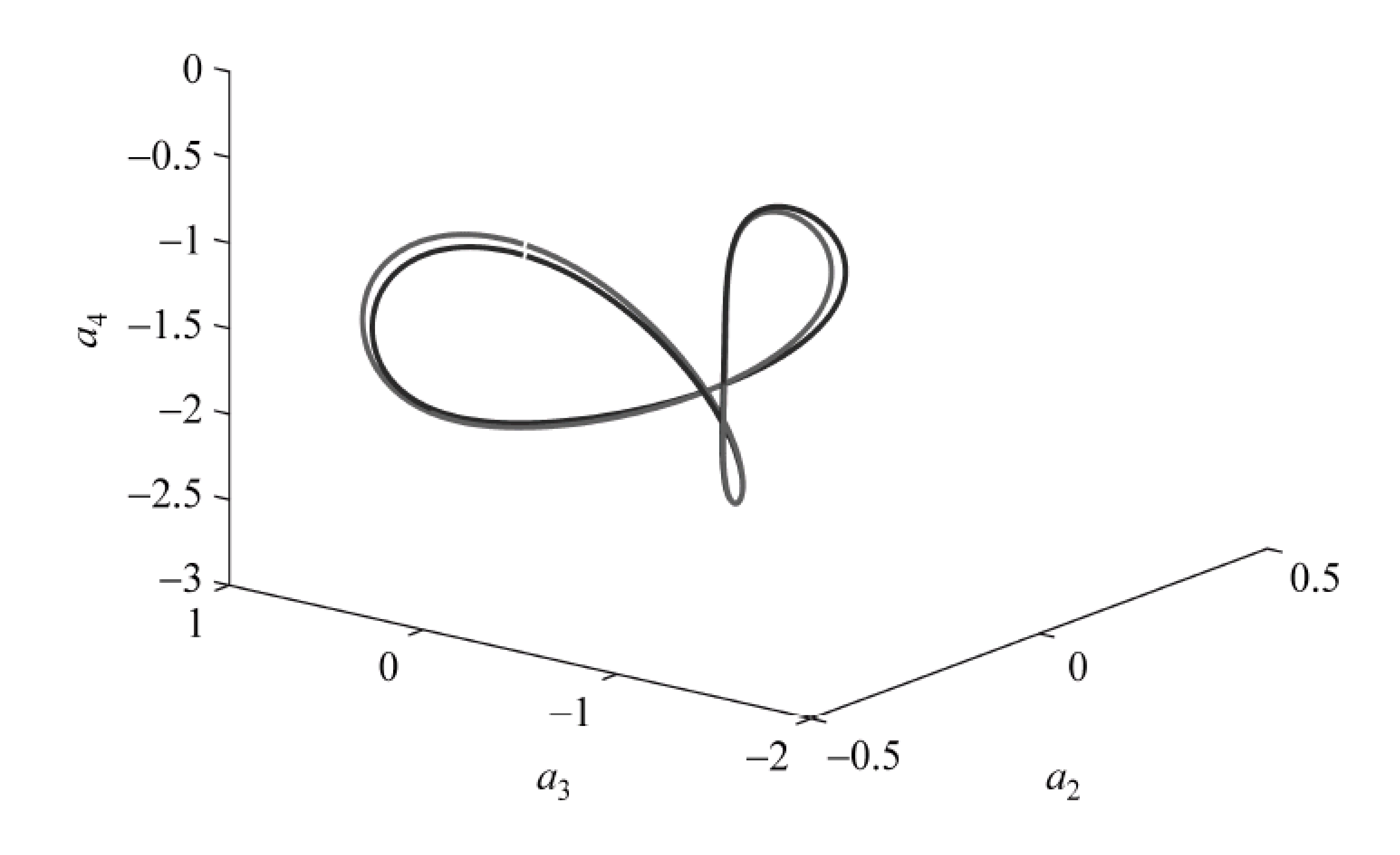


图 4.6　变分法找到的 KS 方程的周期轨道，投影到三维空间 $\{a_2, a_3, a_4\}$，$\nu=0.02991$

图中蓝线是初始猜想的轨道，红线是系统中真实的周期轨道

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

经过一些尝试后我们发现了一些短周期轨道。图 4.7(a)和(b)展示了两条最短的周期轨道，它们具有简单的拓扑结构。这两条轨道都呈现出“8”字形，我们用符号 0 来标记图 4.7(a)的轨道，它在 a_2 方向上的最大投影小于 0.3，周期为 $T=0.8976$。相应的用符号 1 标记图 4.7(b)的轨道，它在 a_2 方向上的最大投影接近 0.3，具有最短的周期 $T=0.8707$。这两条周期轨道能够被用作组成单元来寻找其他结构复杂的周期轨道。

寻找旋转了多圈的复杂周期轨道需要更精确的初始猜想。我们利用图 4.7(a)和(b)展示的两条最短周期轨道建立符号动力学，通过对计算出的短周期轨道进行剪切以及粘贴来初始化长轨道，这种方法对 KS 方程非常适

用,可以为我们系统地构建长轨道的初始猜想。即使手动连接轨道片段使之闭合,变分法也通常收敛。

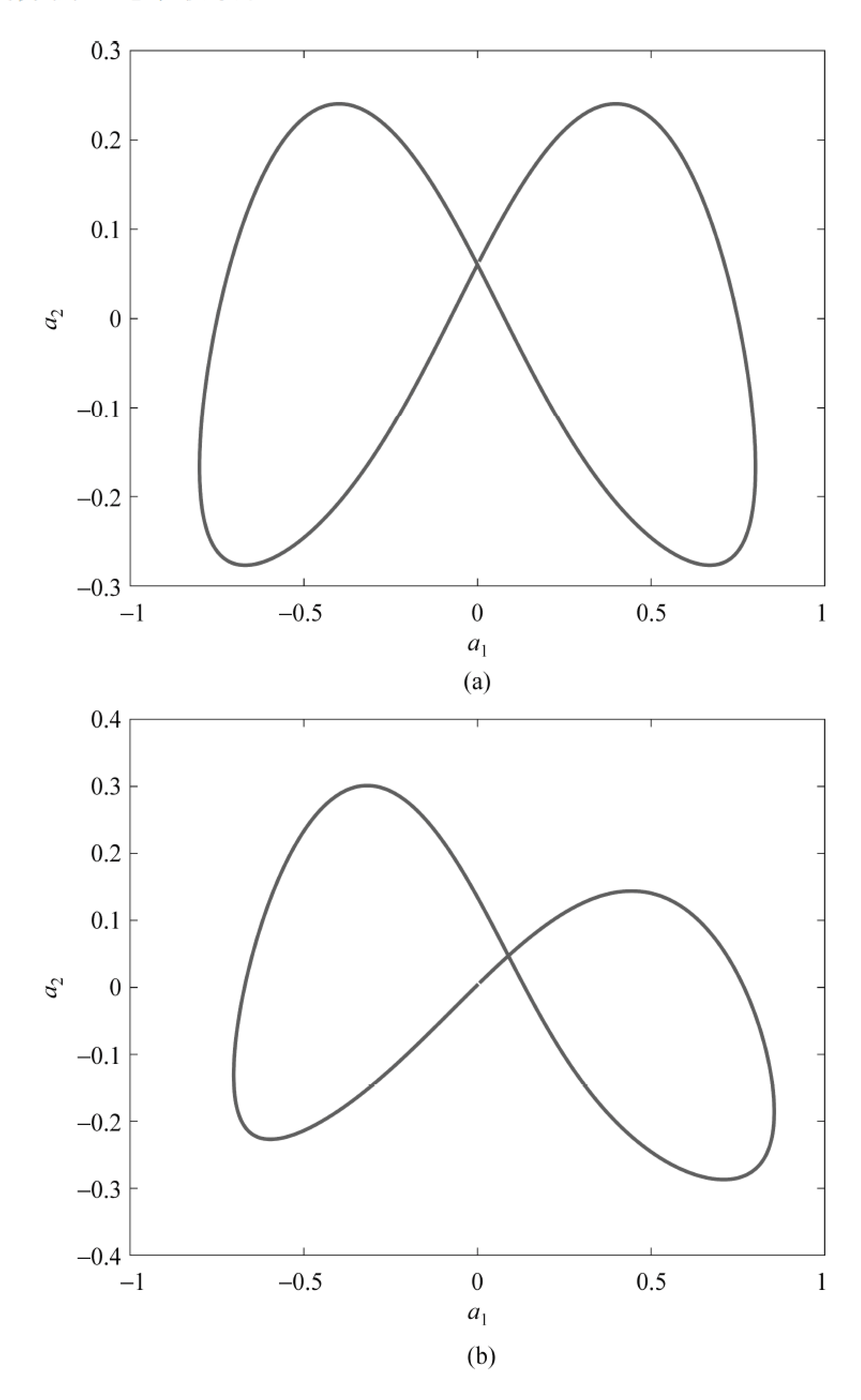


图 4.7　KS 方程四条周期轨道的$\{a_1,a_2\}$投影,$\nu=0.02991$。16 个傅里叶模截断

(a) 0 轨道;(b) 1 轨道;(c) 01 轨道;(d) 001 轨道

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

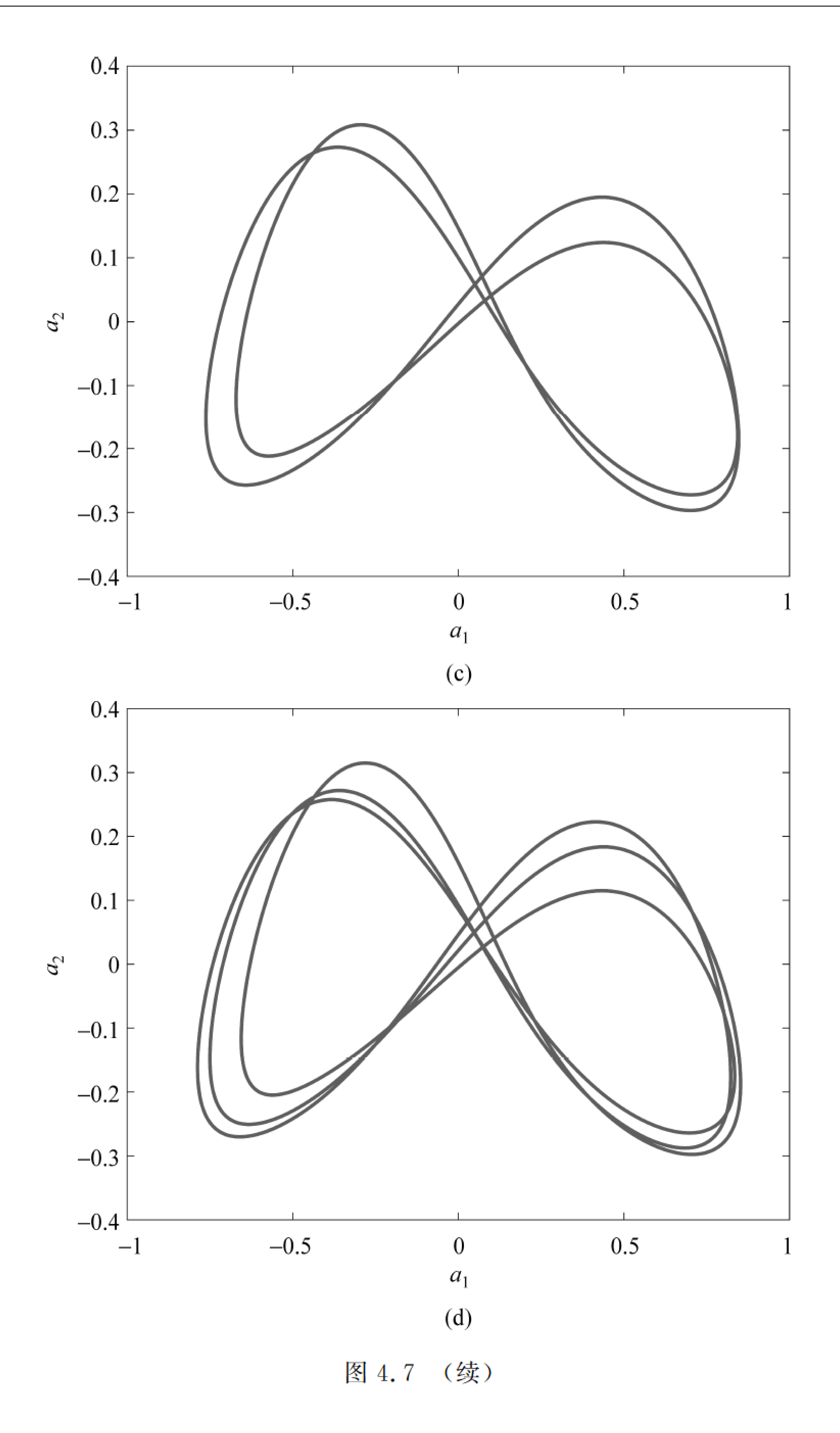


图 4.7　（续）

图 4.7(c) 展示了拓扑长度为 2 的 01 轨道，它是由两条基本的周期轨道构成的。图 4.7(d)展示了拓扑长度为 3 的 001 轨道，它是由两条 0 轨道和一条 1 轨道组成的。在符号动力学的帮助下，成功计算了 KS 方程 $\nu=0.02991$ 时一定拓扑长度以内的所有不稳定周期轨道。我们首先基于符号动力学构

建初始猜想圈,利用变分法使之朝着真实的周期轨道演变,以此来确定这条周期轨道是否存在。

图 4.8(a)展示了拓扑长度为 7 的一条复杂长周期轨道,它的符号序列为 0110101,图 4.8(b)展示了符号序列为 0010110111 的拓扑长度为 10 的轨道。注意到一些符号动力学允许的轨道并不存在。例如,我们没有找到 0001、

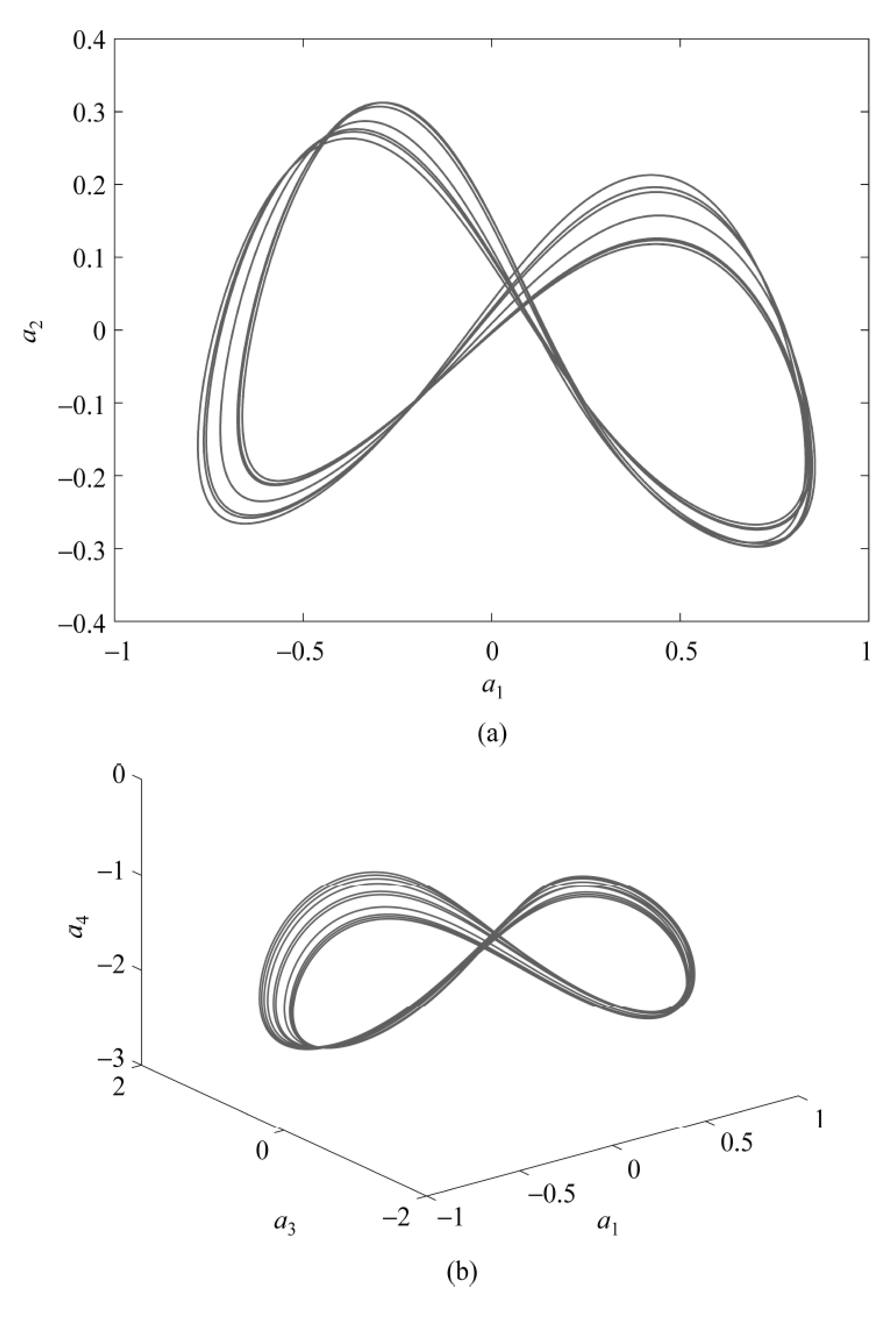


图 4.8　KS 方程的两条长周期轨道

(a) 拓扑长度为 7 的 0110101 轨道;

(b) 一条拓扑长度为 10 的周期轨道投影到$\{a_1, a_3, a_4\}$子空间,$\nu=0.02991$

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

00011、000001 和 0000011 等轨道。总共有 69 条周期轨道被修枝掉了，我们找到了 58 条拓扑长度 9 以内的周期轨道，表 4.1 列出了它们对应的符号序列、拓扑长度和周期。尽管对于更长的轨道来说，我们不清楚它们的修枝规则，但是对于短周期轨道来说，分类方法是很成功的。这也暗示了今后很有可能在空间延展非线性系统中，详尽地构建出分层有序的时空周期不稳定解。

表 4.1　KS 方程拓扑长度 9 以内的周期轨道，$\nu=0.02991$，16 个傅里叶模截断

拓扑长度	符号序列	周期
1	0	0.89765344
	1	0.87072947
2	01	1.75181070
3	001	2.63995411
	011	2.63254458
4	0111	3.49762278
5	00101	4.39397312
	00111	4.39197668
	01101	4.38010357
	01111	4.37089526
6	001101	5.27095986
	001011	5.27512998
	001111	5.26808513
	011101	5.24842832
	011111	5.24032208
7	0010101	6.14520196
	0011101	6.13898423
	0010111	6.14189084
	0011111	6.13609767
	0110101	6.13283020
	0111101	6.12044474
	0111011	6.12892970
	0111111	6.11168739

续表

拓扑长度	符号序列	周期
8	00101001	7.03316051
	00111001	7.02946224
	00110101	7.02564935
	00101101	7.02028553
	00111101	7.01115131
	00101011	7.02962295
	00111011	7.02729317
	00110111	7.02471917
	00101111	7.01479658
	00111111	7.00815696
	01110101	7.00051381
	01101101	7.01180551
	01111101	6.99056136
	01111011	7.00306326
	01111111	6.98209869
9	001011001	7.91461519
	001010101	7.89716390
	001110101	7.89199130
	001101101	7.90275461
	001011101	7.88904617
	001111101	7.88119090
	001011011	7.90820583
	001010111	7.89424672
	001110111	7.88993414
	001101111	7.90104373
	001011111	7.88452902
	001111111	7.87822299
	011010101	7.88438919
	011110101	7.87281425
	011101101	7.87906865

续表

拓扑长度	符号序列	周期
9	011011101	7.87866722
	011111101	7.86160121
	011111011	7.87211929
	011110111	7.86825239
	011111111	7.85298549

注：表中列出了周期轨道对应的拓扑长度、符号序列和周期。

4.4　小结与讨论

本章讨论了一维 KS 方程的动力学性质以及它的周期轨道。我们应用变分法，借助于一维符号动力学，通过结合两条基本的组成单元来构建不同的长轨道初始猜想，成功找到了系统一定拓扑长度以内的所有不稳定周期轨道。创新点是一维符号动力学的建立方式，今后在研究混沌系统时可以按拓扑的方式来分类周期解。

仍然有一些问题需要进一步的研究，例如，为了有效的获取动力学性质，应该也考虑分析连接轨道等其他的不变集合。应用周期轨道理论计算动力学平均时，需要对轨道展开，利用短周期轨道来获取吸引子的主要性质，这要求我们不能错失任何短的周期轨道，而忽略掉长的周期轨道则对计算精度影响不大。寻找短轨道相对来说要容易一些，本章已经计算出了 KS 方程所有的短周期轨道。在此基础上，我们对 KS 方程吸引子的性质有了进一步的理解，进而可以利用这些短周期轨道来计算平均值。

第 5 章　静态 Kuramoto-Sivashinsky 方程的周期轨道

第 3 章详细介绍了寻找高维复杂系统中不稳定周期轨道的强有力数值方法：变分法。本章将应用变分法，以动力系统的观点系统地分类静态 KS 方程的不稳定周期轨道。我们找出了 $L=43.5$ 时 KS 方程重要的不动点，这些不动点对动力系统起到了组织作用。对静态 KS 方程进行首次积分推导出了一个具有积分常数 c 的三维动力系统，当取固定的积分常数 $c=0.40194$ 时，我们以静态 KS 方程四条最简单的周期轨道作为组成单元，在此基础上构建寻找更长周期轨道的初始化条件。基于轨道的拓扑结构建立符号动力学的方式对于分类所有的短周期轨道显得非常有效。我们也适当选取了一个庞加莱截面，得到了这些周期轨道在该截面上的二维映射，从而显示出了动力系统的复杂性。我们研究了四条基本轨道的分岔情况，为在一定周期范围内寻找轨道提供了追溯的途径。

5.1　背景介绍

动力系统和湍流经历了数个世纪的研究[109]。当研究长时间的非线性动力系统行为时，由于混沌运动和初始条件紧密相关，想要精确预言出物理量的值是行不通的，原则上我们只能算出物理量的平均值。大多数的方法都不能给出准确的结果，正如第 2 章里介绍的那样，轨道展开成了计算动力系统物理量平均值的一种很有效的方法。该理论通过把找到的一定拓扑长度以内的所有周期轨道有序排列，进而计算出混沌系统的长期平均值。如果系统是均匀双曲的，只计算短的周期轨道忽略长的周期轨道也可以得到很好的精度，轨道展开随着周期轨道长度的增加快速收敛。所以短的周期轨道在计算动力学平均时起着非常重要的作用。此外，非线性系统的奇怪吸引子是由无

穷多条不稳定周期轨道稠密覆盖的，它可以通过一定拓扑长度以内的周期轨道很好地表现出来。由于周期轨道是相空间中除了不动点之外最简单的非平庸紧不变集，对于大多数非线性系统来讲，例如流体的湍流运动，它是包含有复杂动力学的高维空间延展系统，找出这些不稳定的周期轨道并加以研究就显得尤为重要。

周期轨道理论能够被应用到时空混沌系统的研究中去[27]。在具有周期性边界条件的 KS 方程反对称的子空间里，借助于多点打靶法在混沌的开端处以及周期窗口处可以找出 100 多条不稳定的周期轨道。对于所选取的参数值，16 个傅里叶模截断就给出了很精确的结果。该工作通过构建一个内在的低维曲线坐标，把一个无穷维的流约化成了近似的一维映射，使得我们可以基于经验建立起符号动力学，系统地分类所有的短周期轨道。

佐尔迪等在 1998 年研究了具有固定边界条件的一个更高维的系统[110]。他们选取了 120000 个随意的初始点，用阻尼牛顿法来寻找，最终发现了 100 多条不稳定的周期轨道，但是像这样盲目地寻找并不能保证所有的短周期轨道都可以找齐。算出的周期轨道都在渐近吸引子上，这显示了研究延展系统时所面临的困难。文献[111]里介绍了 KS 方程在反对称子空间里的工作，该工作在动力系统重要的不动点处建立了不稳定的流形，并且在这些流形上定义了内在的曲线坐标，从而系统地研究了复现斑图。文献[112]介绍了具有周期性边界条件的完整 KS 方程详细的相空间结构，在他们的工作里，不动点和周期轨道继续起着重要的作用。

KS 方程是研究时空混沌的一个范例，不仅因为此方程的斑图中富有大量的信息，此外该方程也与描述黏性流体流动的纳维-斯托克斯方程在形式上类似。流体动力学的研究表明，湍流是在不稳定的解附近组织起来的，这些不稳定的解包含稳态、旅行波以及主方程的周期轨道[113]。它们提供了无序动力学的组成单元，也很有希望被用于湍流运动的基本组成单元。在大的空间尺度极限条件下，KS 方程展示了有趣的时空混沌动力学。不过令人遗憾的是，大多数的工作都把 KS 方程局限在一维情况下进行研究，解的湍流特征因此相当有局限性。随着系统尺度的增加，动力系统会变得越来越难以把握，于是就增大了研究的难度。文献[114]研究了一个二维湍流柯尔莫哥洛夫流中的周期轨道，作者用周期轨道理论重构湍流关键的统计特征。文

献[115]里作者研究了平面库埃特流中的周期轨道，他们建立了轨道的双值符号动力学并且作了分岔分析。后面有关静态KS方程周期轨道的研究表明，不动点起到了粗糙的组织作用。

静态KS方程在时空动力学的研究中起着特殊的作用，该领域经历了相当长一段时间的研究[116,117]。在一定的参数范围内，稳态解可以直接用于解释完整的KS方程观察到的动力学，例如，n 细胞态在离散的窗口，甚至取任意大的系统尺度下是稳定的[118]。然而当积分常数 $c\to\infty$ 时（c 在式(5-8)里定义），式(5-9)中连接两个不动点的反对称的异宿轨道是唯一的有界且非常数解[119]。当 c 取足够大时，这条异宿轨道仍然是唯一的有界解[120]。c 值降到0.07时仍然可以在数值上观察到这条轨道[121]，并且在 $c\ll 1$ 的情况下，可以通过范式解析地计算出来[122]。c 值逐渐减小时，通过鞍结分岔产生出了新的连接轨道，直到出现了连接轨道取极限时变为周期轨道为止。在一定的参数区间，对空间傅里叶模的分岔分析可以给出静态KS方程周期轨道的有趣特征[123]。

前面提到的所有工作都没有提供一种系统的方法来分类和研究一般系统尺度或者固定 c 值时的静态KS方程不稳定周期轨道。稳态方程的紧不变集是一个排斥子，大多数的轨道都逃逸得很快，通常的数值方法来寻找系统的不稳定周期轨道是行不通的，甚至在合理猜出了轨道的情况下算法也会失败。即便发现了一些轨道，我们也不知道它们到底存在多少条以及彼此间是如何相关联的。本章用变分法计算静态KS方程的不稳定周期轨道，根据相空间轨道的拓扑结构建立符号动力学，进而对所有找到的不稳定周期轨道进行分类。我们也提出了一条经验的修枝规则，用来验证轨道的存在性。最后通过不断地改变参数，我们来研究这些基本轨道的分岔情况。

拓扑的方法在非线性动力系统的研究中应用很广泛。符号动力学也被广泛研究，它通常能够被应用到一维映射中去，但是在二维或者更高维数的映射中建立就较为困难了。尽管早期研究受限三体问题时已经利用了轨道的拓扑性质进行分类[124]，但是直到最近符号动力学和拓扑性的结合才逐渐引起了更多的关注，在研究三维流时使用了复杂的数学工具如纽结理论。本章根据静态KS方程周期轨道绕着两个不动点的圈数来建立符号动力学，这提供了一种分类轨道的新方法。

本章各节的内容安排如下：在 5.2 节，首先简要回顾一下 KS 方程的基本性质以及计算周期轨道的变分法，随后研究 $L=43.5$ 时 KS 方程的稳态解，这在对此非线性偏微分方程进行数值计算时会经常用到；接着在 5.3 节我们以动力系统的方式，系统地研究固定积分常数取 $c=0.40194$ 时的静态 KS 方程不稳定周期轨道；5.4 节我们将研究该系统一些基本轨道的分岔情况；最后在 5.5 节，我们将对本章作一小结并讨论一些开放式的问题。

5.2　寻找 $L=43.5$ 时 KS 方程的重要不动点

回顾一下前面介绍的 KS 方程，该方程能够在动力系统理论的框架下进行研究，表现出了丰富的动力学行为。它可以描述多种物理现象，用途极广。一维 KS 方程的形式是

$$u_t = (u^2)_x - u_{xx} - \nu u_{xxxx} \tag{5-1}$$

场的强度 $u(x,t)$ 是空间坐标 x 以及时间变量 t 的函数。ν 是一个阻尼参数，它控制系统的耗散率。我们研究具有周期性边界条件的 KS 方程，系统的尺度用 L 来表征，把它当成是新参量。式(5-1)可以用一系列的空间傅里叶模展开

$$u(x,t) = \mathrm{i}\sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kqx} \tag{5-2}$$

这里 $q=2\pi/L$，是基本的波数。KS 方程从而被转化为关于复傅里叶系数的无穷阶耦合的常微分方程

$$\dot{a}_k = [(kq)^2 - \nu(kq)^4]a_k - kq\sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m a_{k-m} \tag{5-3}$$

点号代表变量对时间求导。注意到 $\dot{a}_0=0$，因此 a_0 是一个守恒量，可取 $a_0=0$。对于大波数的模来讲，耗散项起主导作用。我们可以把无穷阶的方程(5-3)截断成有限个数的方程，即当 $|k|>N$ 时，取 $a_k=0$，有时也称这个截断为伽辽金(Galerkin)投影。当 L 足够小时，所有的傅里叶模变得线性稳定，所以原点是一个局域的吸引子。事实上当 $L<2\pi\sqrt{\nu}$ 时，$u(x,t)=0$ 也是全局吸引子。随着系统尺度 L 的增加，系统变得越来越不稳定和湍流，可以数值观察到存在混沌运动。当 L 变得足够大时，大多数初始条件的点会在态空间的固定区域内盘旋。图 5.1 展示了 $L=38.5$ 和 $L=41.5$ 时 KS 方程两个不同傅里叶模的

投影图,可以看到系统在这两个尺度下的轨道运动已经呈现出了混沌状态。文献[104]研究了 KS 方程在 $L=38.5$ 时反对称子空间里的一些性质,可以在 $a_1\approx\pm0.15$ 处把态空间分成三个区域分别加以研究。

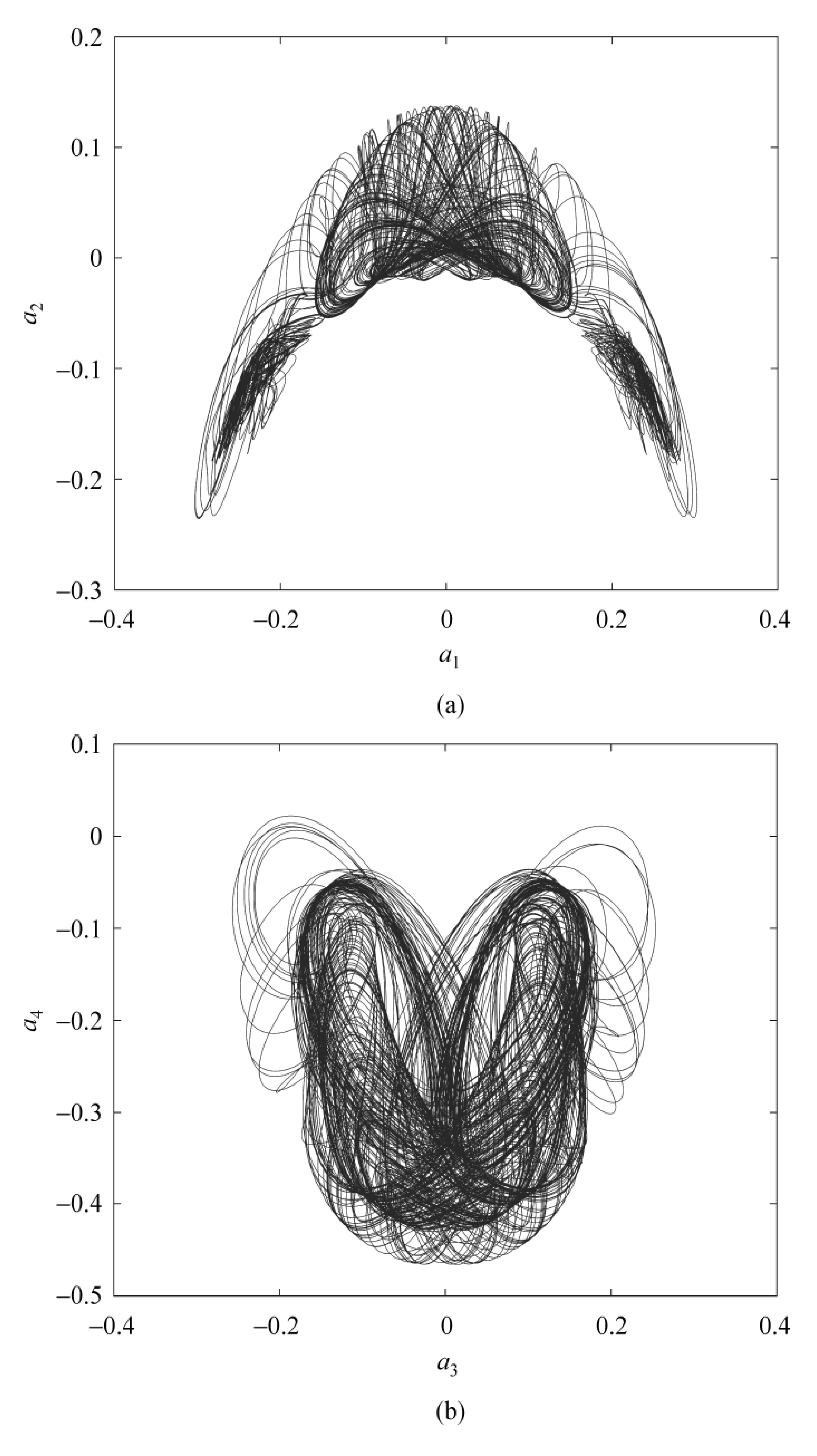
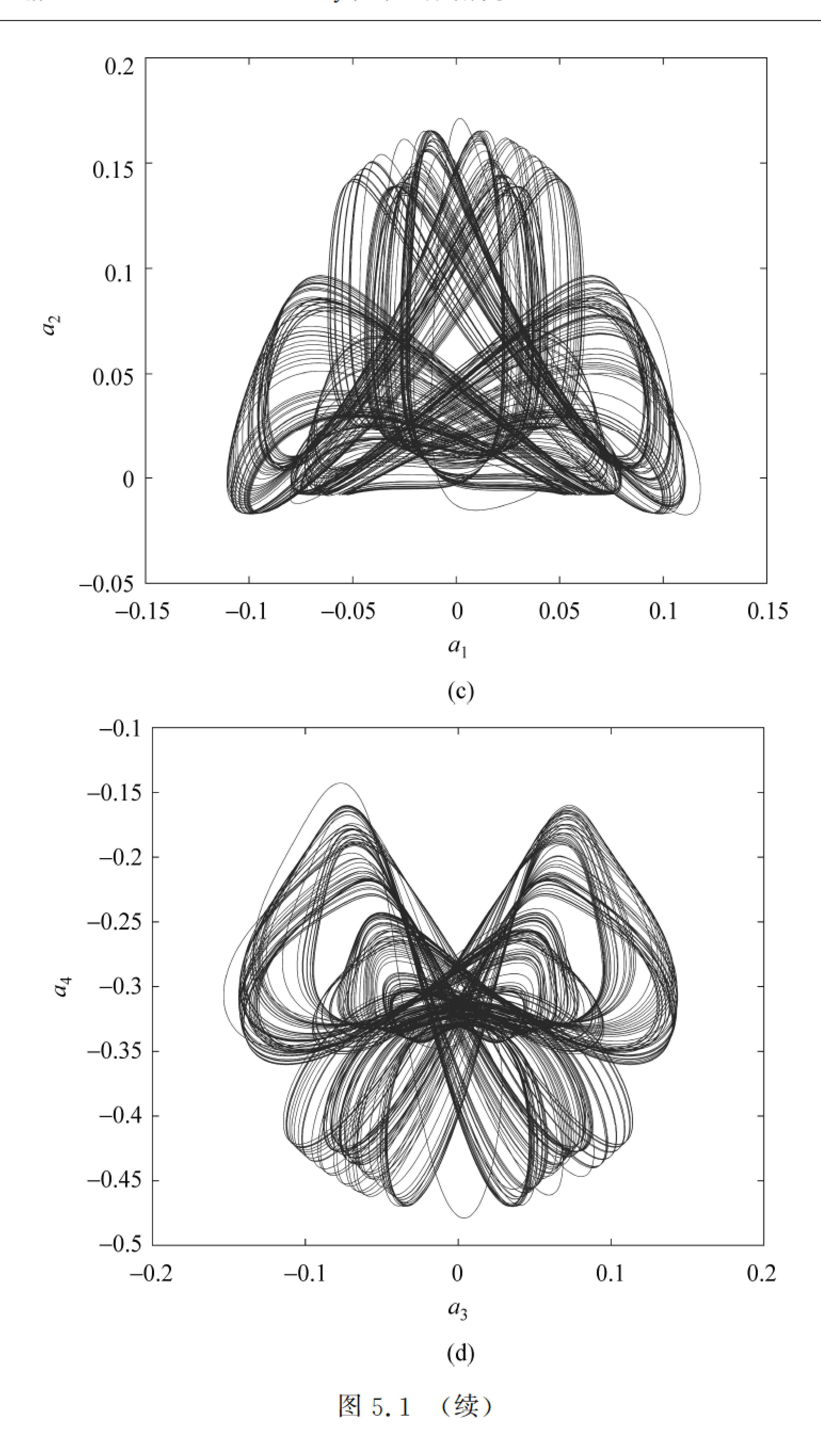


图 5.1　KS 方程吸引子的二维投影图

(a),(b) $L=38.5$; (c),(d) $L=41.5$

(阅读彩图请扫 158 页二维码)



(c)

(d)

图 5.1 （续）

图 5.2(a)、(b)、(c)展示了当 $L=43.5$ 时，在实空间以及傅里叶模空间中 KS 方程的轨道随时间的演化情况。从图 5.2(a)中可以看到 $u(x,t)$的空间波形各个峰呈“Z 字形”运动。在该尺度下来看，典型的结构特征表明系统运动看起来已经很混沌了。图 5.2(b)和(c)可以很清楚地表明，前几个傅里叶模的大小几乎在同样的数量级上，这暗示了轨道具有复杂的空间结构。在这样

的一个高维态空间里如何分析动力学性质以及时空非平庸轨道的结构，仍然是一个开放式的问题。第一步来说，这里我们系统地寻找 KS 方程的稳态解，它在某种程度上起了组织作用并且定义了相空间中混沌运动的位置。在周期性边界条件下，稳态解也就是稳态方程的周期轨道。

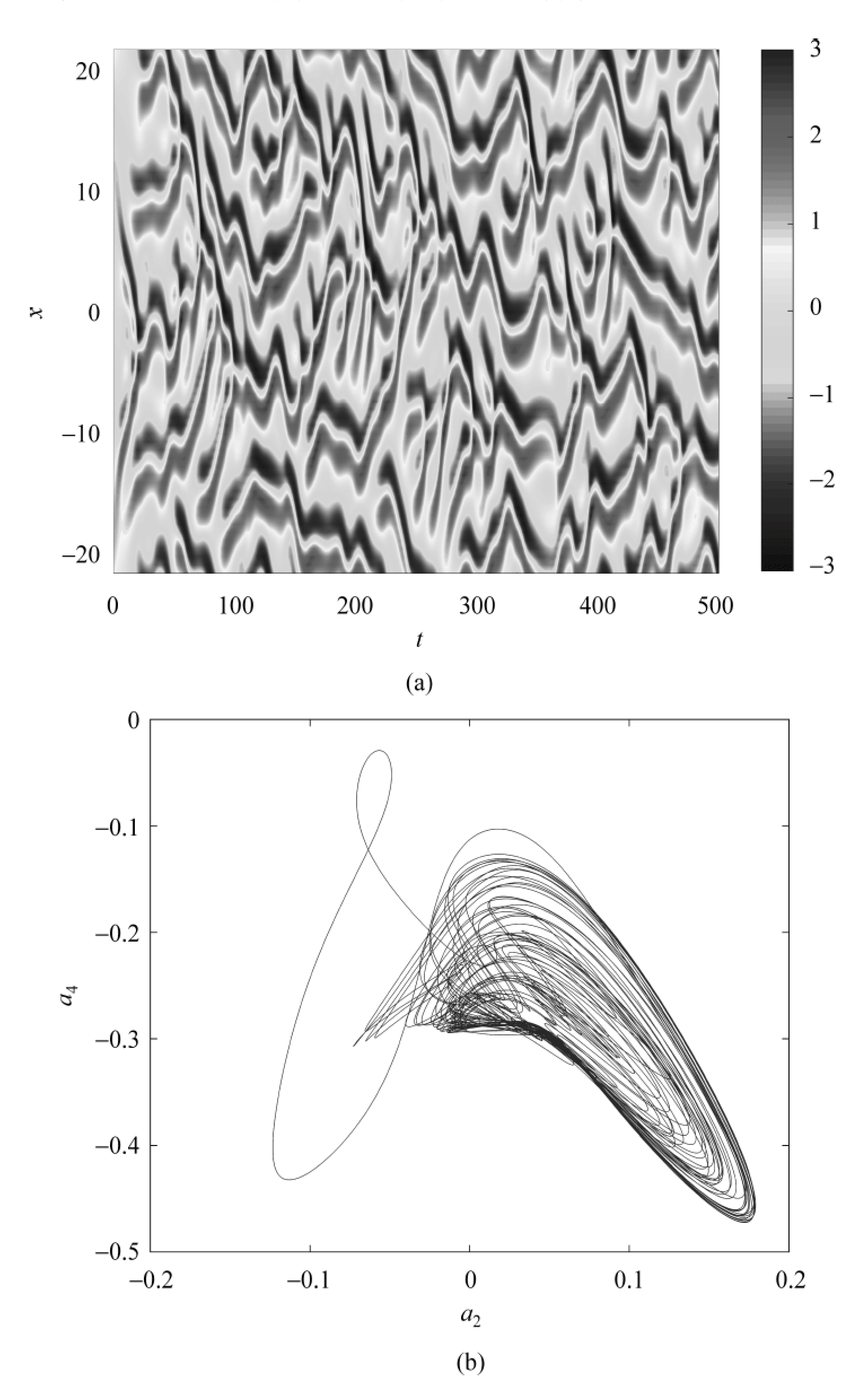
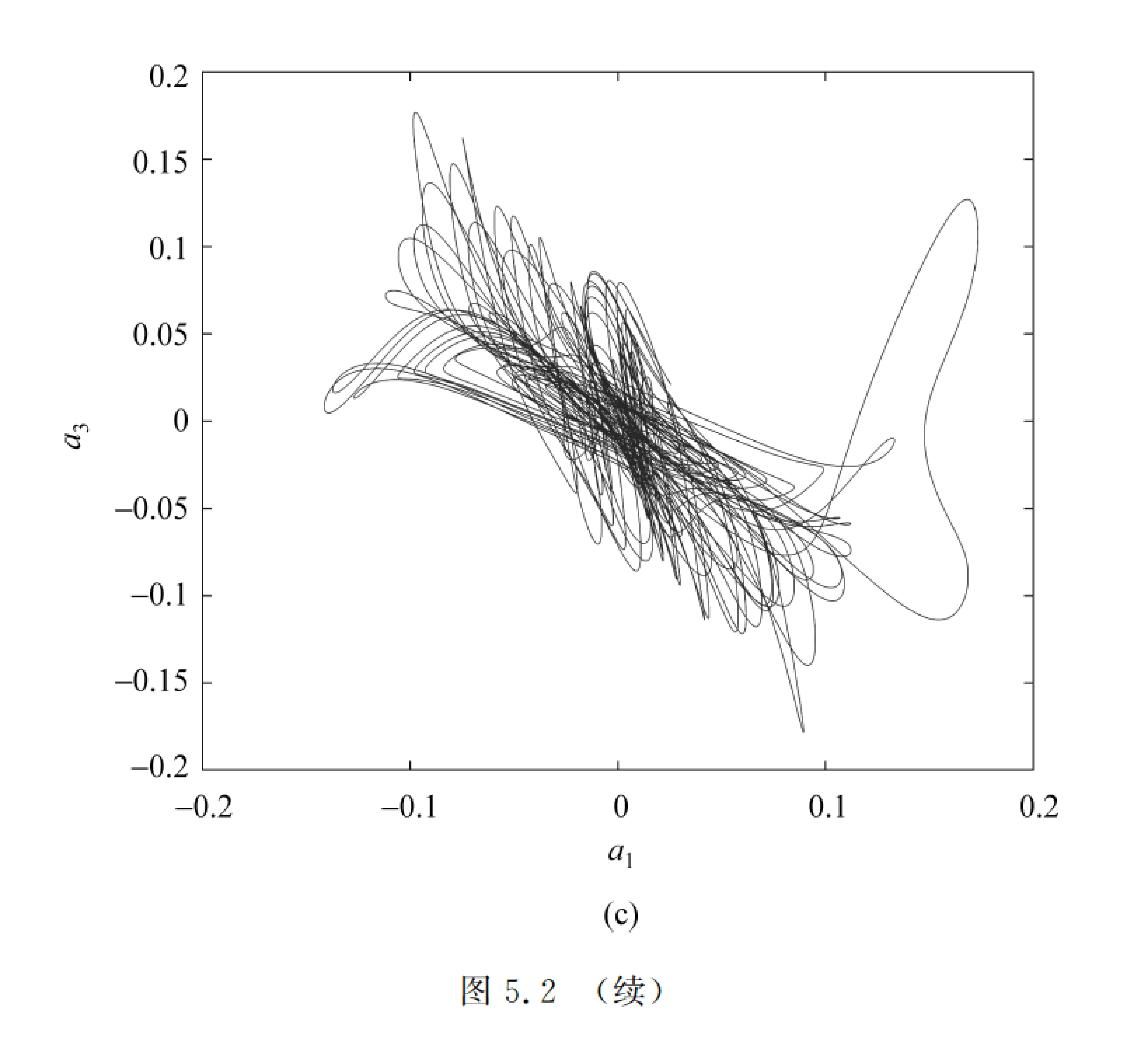


图 5.2　$L=43.5, \nu=1$ 时混沌轨道的长时间演化图，32 个傅里叶模截断

(a) $u(x,t)$在(t,x)平面上的空间—时间表示，不同的颜色代表着 $u(x,t)$不同的大小；(b) (a_2,a_4)傅里叶模的实部投影；(c) (a_1,a_3)投影

（阅读彩图请扫 158 页二维码）



(c)

图 5.2 (续)

第 3 章介绍了几种用来寻找周期轨道的数值方法。在运行寻找程序之前,对动力系统有着比较清楚的了解可以帮助我们更好地猜到初始点的位置,从而避免盲目寻找。对于大尺度的 KS 方程而言,因为相空间中轨道的结构很复杂,实践表明多数的数值方法都会失败。为了研究湍流区的动力学,我们采用变分法来寻找不稳定的周期轨道,通过利用一个虚拟的时间演化方程,把初始猜想圈演变到一个真正的周期轨道上去:

$$\frac{\partial^2 \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s \partial \tau} - \lambda \boldsymbol{A} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial \tau} - \boldsymbol{v} \frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}\tau} = \lambda \boldsymbol{v} - \tilde{\boldsymbol{v}} \tag{5-4}$$

这里 $\boldsymbol{v}$ 是流矢量,它定义了动力系统 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{v}(\boldsymbol{x})$。圈的微分 $\tilde{\boldsymbol{v}} = \mathrm{d}\tilde{\boldsymbol{x}}/\mathrm{d}s$ 是一个矢量,它和由 $s \in [0, 2\pi]$ 参数化了的初始猜想圈相切。$\lambda = \lambda(\tau)$ 是一个用来控制轨道周期的参数。τ 是虚拟的演化时间,它控制迭代次数,$\boldsymbol{A} = \partial \boldsymbol{v} / \partial \boldsymbol{x}$ 是速度场的梯度矩阵。变分法利用了一个减小的成本函数

$$I = \int_0^{2\pi} \left(\tilde{\boldsymbol{v}} - \lambda \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial s} \right)^2 \mathrm{d}s \tag{5-5}$$

使得圈和周期轨道之间的差别以指数速度减小。变分法和其他方法相比优势是:由于用整个圈作初始猜想,数值上会更加稳定,从而避免了在高维相空间里选取多个庞加莱截面,这通常是很难找到的。

相应地，如果矢量场方程里含有参数 c，我们也可以找到给定周期 T 对应着不同参数 c 的所有不稳定周期轨道。圈和参数的演化方程是式(5-4)的变形

$$\left(\boldsymbol{A}-\lambda\frac{\partial}{\partial s}\right)\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \tau}+\frac{\partial \boldsymbol{v}_c}{\partial c}\frac{\partial c}{\partial \tau}=-\left(\boldsymbol{v}_c-\lambda\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial s}\right) \tag{5-6}$$

其中 $\boldsymbol{v}_c$ 是和参数 c 相关的矢量场，常数 λ 起到固定周期的作用，式(5-6)也有一个指数减小的成本函数。在计算周期轨道的同时，未知的参数 c 也能够得到。

数值计算时，为了解式(5-4)或式(5-6)，我们采用有限差分方法来离散化，圈的微分可以用五点近似法来近似。相应的含有边界项的带状对角矩阵可以通过带状 LU 分解法求出逆来，我们用伍德伯里(Woodbury)公式来处理边界项。

有许多种初始化圈的方法。例如，为了得到 KS 方程的周期轨道，我们首先对动力系统进行长时间的数值积分。这可以让我们对态空间里轨道密集的区域有一定的了解，进而从中摘取出接近周期的轨道。我们选择那些接近闭合的轨道片段，通过快速傅里叶变换使之平滑，变成波数表示，然后去掉高频部分，作逆快速傅里叶变换到态空间就得到了一个闭合的初始化圈。另外一种初始化的方法是利用已知轨道的绝热形变。当参数值有小的改变时大多数短的不稳定周期轨道变化很小，所以在某一参数下存在的一个周期轨道，可以被选作附近的新参数值的初始猜想圈。我们后面会提到另外一种寻找不稳定周期轨道的初始化方法，计算静态 KS 方程的周期轨道时用该方法来初始化。

不动点(稳态解)是相空间里最简单的不变集，它们的分布以及这些不动点之间的连接就构成了相空间轨道分布的一个粗糙的几何图像。在 KS 方程里，从 $u\equiv 0$ 的平庸态到混沌发生的开端，期间系统经历了一系列的分岔过程。在此过程中，不动点扮演了非常重要的作用，它建立起了时空混沌组成单元的尺度。KS 方程的稳态解（即静态 KS 方程）满足：

$$(u^2)_x-u_{xx}-\nu u_{xxxx}=0 \tag{5-7}$$

对上式作一次积分得到

$$u^2-u_x-\nu u_{xxx}=c \tag{5-8}$$

其中 c 是积分常数，它的取值决定了方程(5-8)解的性质。在接下来的计算中，为了不失一般性，我们取 $\nu=1$。式(5-8)可以写成三维动力系统的形式：

$$\begin{aligned} u_x &= v \\ v_x &= w \\ w_x &= u^2 - v - c \end{aligned} \tag{5-9}$$

静态 KS 方程存在时间反演对称性

$$x \to -x,\quad u \to -u,\quad v \to v,\quad w \to -w \tag{5-10}$$

我们看到，式(5-9)速度场的梯度矩阵的迹是 0，这暗示了系统的流是保测度的。

从式(5-9)能够看出

$$(u+w)_x = u^2 - c \tag{5-11}$$

所以，当 $c<0$ 时，$u+w$ 在 $x\to\infty$时没有限制的增加，每一个解都到了无穷远处，静态 KS 方程没有有界解。如果 $c=0$，原点是唯一的有界解，其他的解为无穷大。如果 $c>0$，随着 c 取不同的值，动力系统会变得很有趣，有界解会变得极其复杂。当 $c>0$ 时，系统存在两个不动点

$$\boldsymbol{c}_+ = (\sqrt{c},0,0),\quad \boldsymbol{c}_- = (-\sqrt{c},0,0) \tag{5-12}$$

在 $\boldsymbol{c}_+$ 附近做线性化，可以算出系统的本征值为 $2\lambda_1$ 和 $-\lambda_1 \pm \mathrm{i}\lambda_2$

$$\lambda_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}\sinh\varphi,\quad \lambda_2 = \cosh\varphi \tag{5-13}$$

$\sinh 3\varphi = 3\sqrt{3c}$。更具体来说，$\boldsymbol{c}_+$ 有一个一维不稳定流形以及一个使得轨道旋入的二维稳定流形。由于系统的时间反演对称性，$\boldsymbol{c}_-$ 也有一个类似的流形，但是具有相反的稳定性质。

动力系统的逃逸轨道居于主导地位，它占据了相空间的绝大部分[125]，这给数值计算带来了极大的难度，即便初值条件选在周期轨道附近，积分一段时间后轨道也将逃逸掉。早期在研究该问题时采用了一些不同的方法[126-128]。为了有效计算这些不稳定的周期轨道，我们采用变分法，该方法显示了它强大的有效性。

系统方程(5-3)轨道上的任意一个点都对应着式(5-9)三维态空间的一个圈，这可以用作在间隔[0,L]上寻找周期轨道的初始化猜想。在对一条长轨道测试许多个点以后，我们用变分法最终找到了式(5-9)在 $L=43.5$，$\nu=1$

时的 13 条周期轨道，它们也就是式(5-3)的 13 个不动点。显然不是所有的不动点都是重要的，为了说明它们中的哪些是比较重要的，我们取演化时间 $T=200$，从一条长轨道上均匀地选择 2000 个点，然后逐个计算每一个点到 13 个不动点的距离。如果轨道上的一个点离某个不动点最近，那么就把轨道上的这个点归类于该不动点。图 5.3 展示了这些不动点的数目分布，从图中可以看到，不动点 2 和 7 归到的点的数目最多，这表明了相空间的轨道频繁地绕着这两个不动点转。然而，仅仅通过这点，仍然很难称之为“重要的”，因为对于那些权重较小的不动点，相空间的动力学或许通过它们的稳定或不稳定流形来组织。

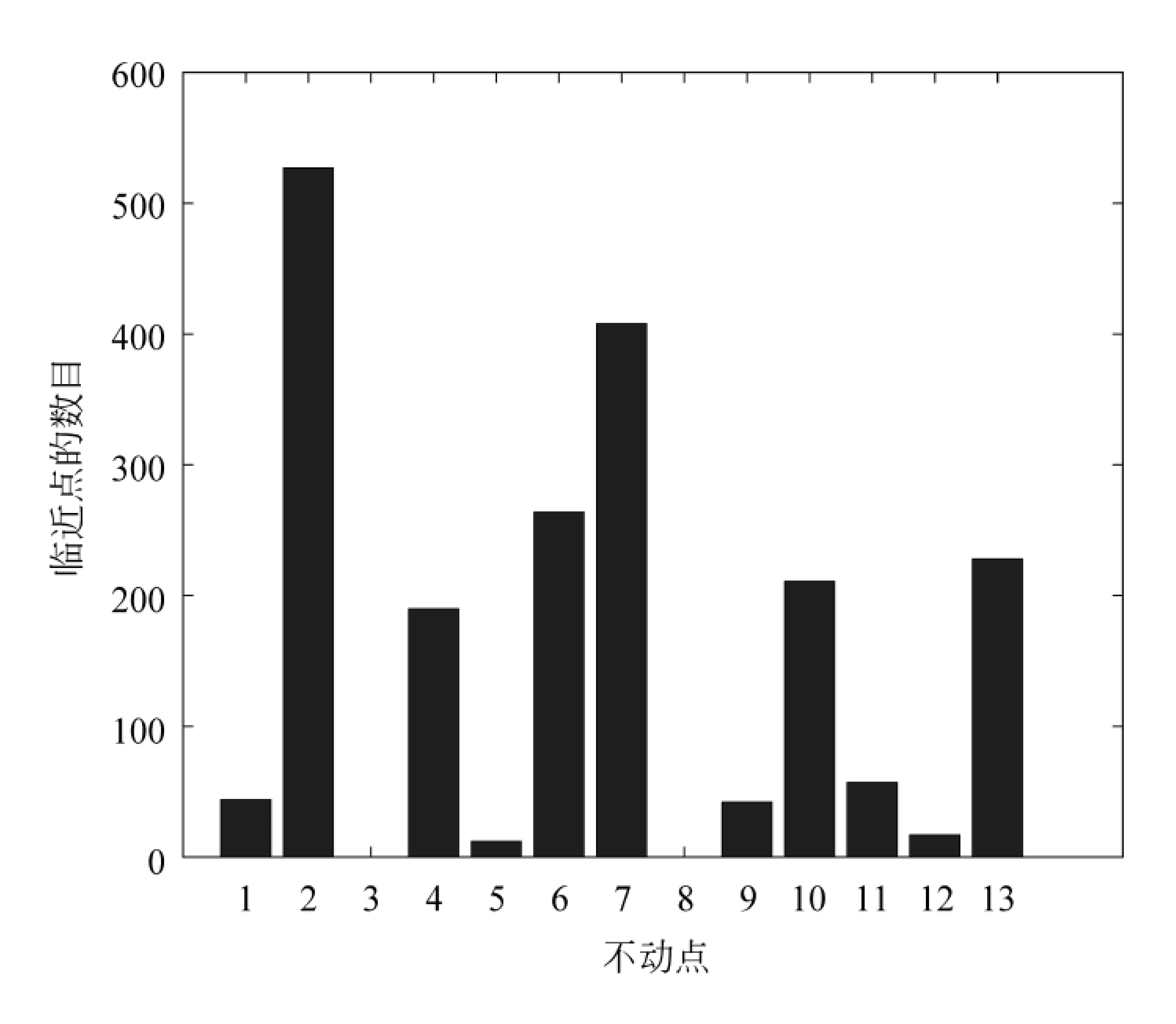


图 5.3　一条长轨道上距离 13 个不动点最近的点的分布图

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

图 5.4 展示了其中三个不动点 2、7 和 6 的轨道以及它们在间隔[0,43.5]上空间的波形图。非震荡集里的一条典型的轨道和图 5.4 所示的不动点形状很像。在长时间演化的两个典型时刻，图 5.5 中(u,u_x)所表示的轨道图以及空间波形图和图 5.4 不动点的图像很类似：图 5.5(a)和图 5.4(a)很像，图 5.5(c)和图 5.4(c)很像。我们也核查了系统长轨道上的许多其他态，发现它们中的大多数都在形状上和找到的稳态解很像。从这个角度来说，可以认为相空间的轨道是由这些不动点近似组织和剖分的。

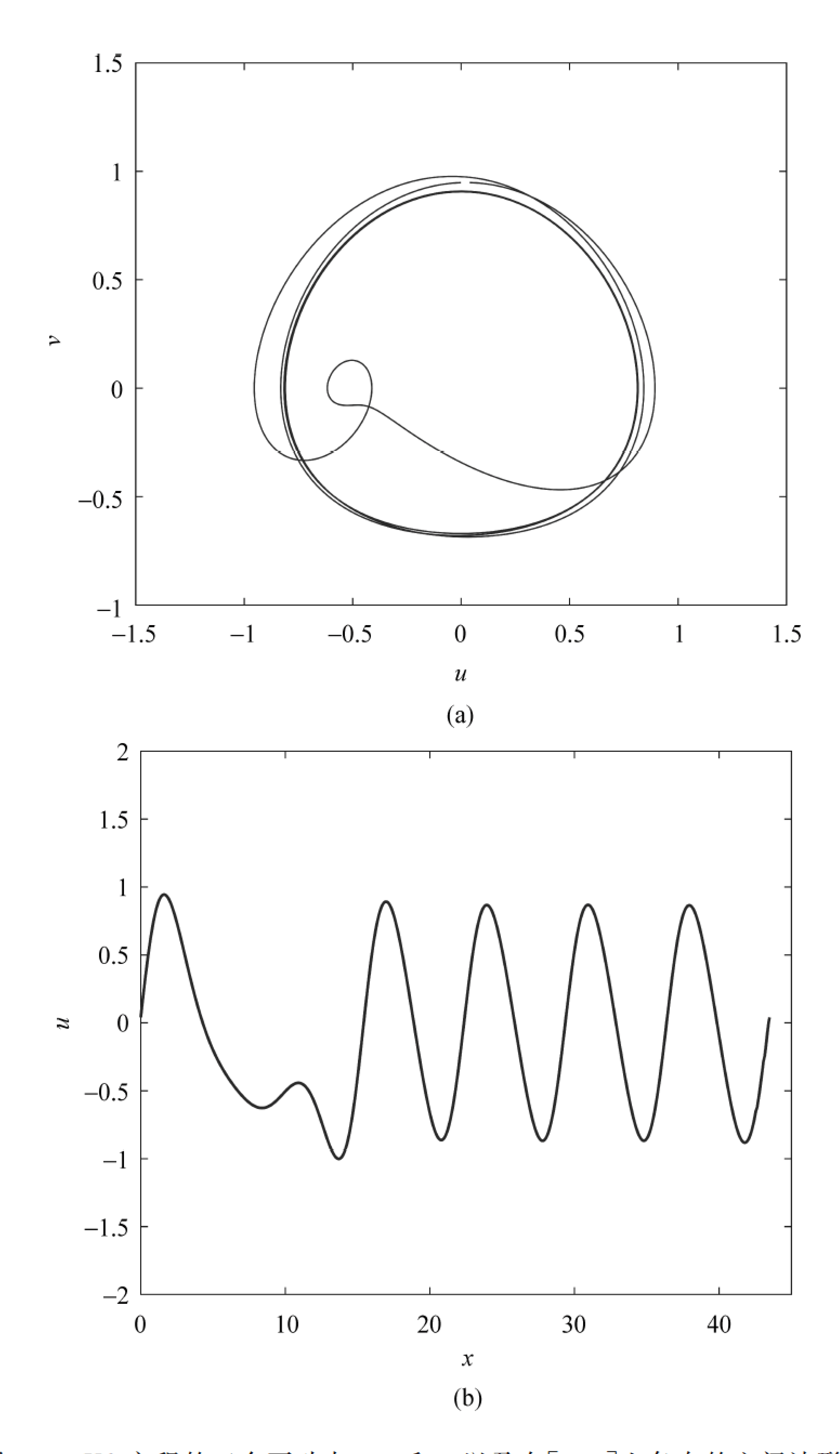
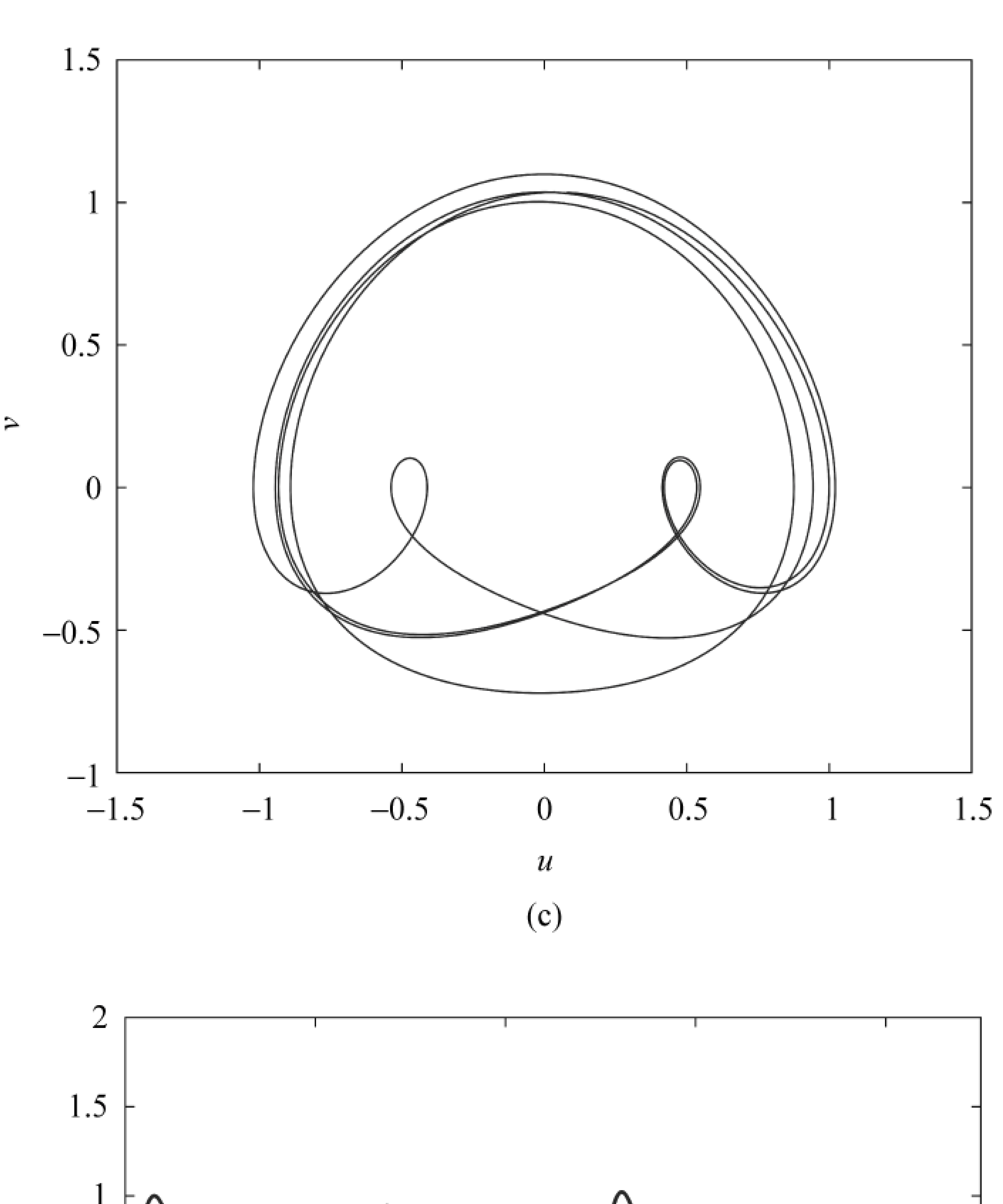


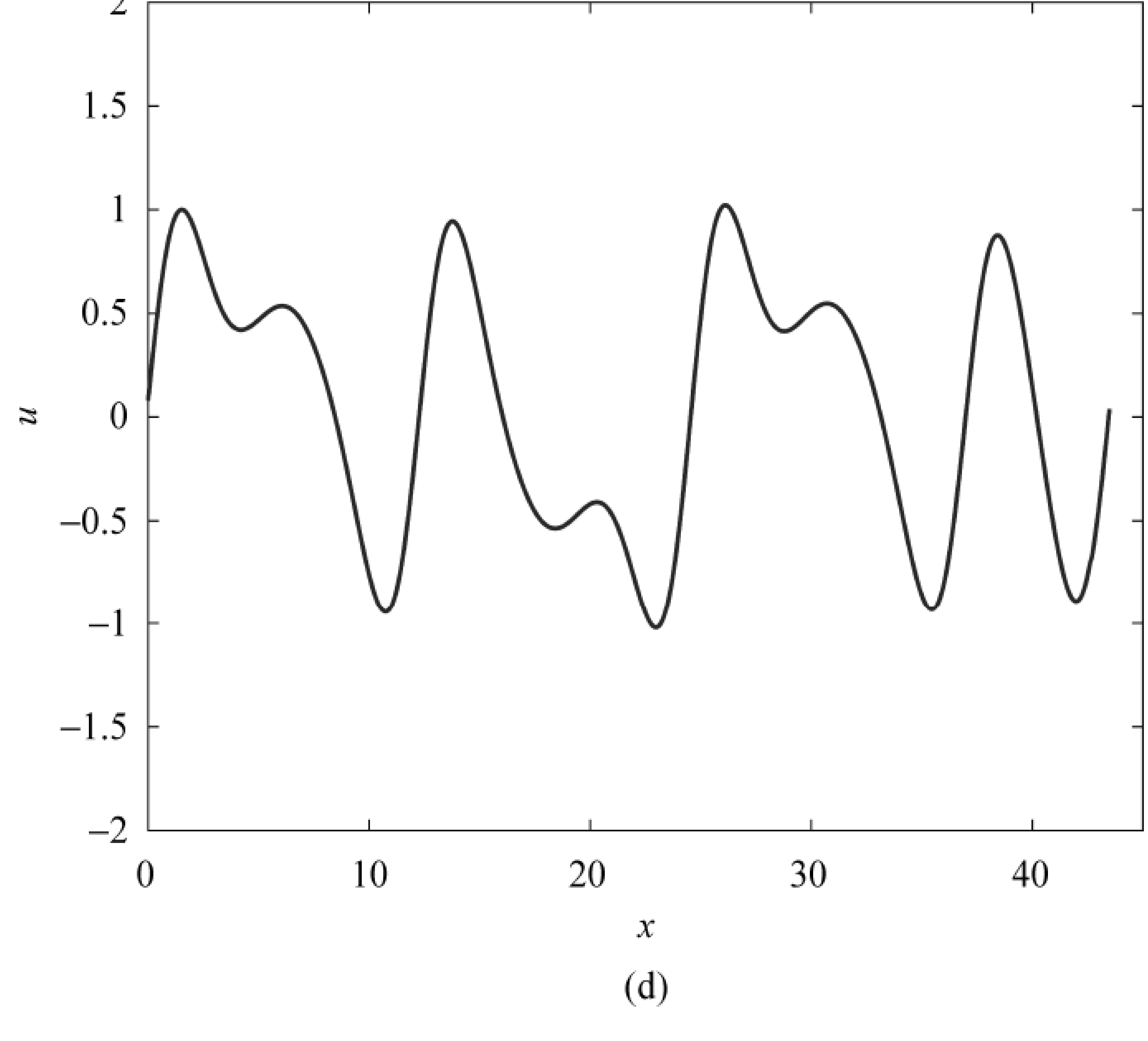
图 5.4　KS 方程的三个不动点 2、7 和 6 以及在[0,L]上各自的空间波形图

(a),(b) c=0.32923；(c),(d) c=0.37302；(e),(f) c=0.23581。L=43.5,ν=1

(阅读彩图请扫 158 页二维码)



(c)



(d)

图 5.4 （续）

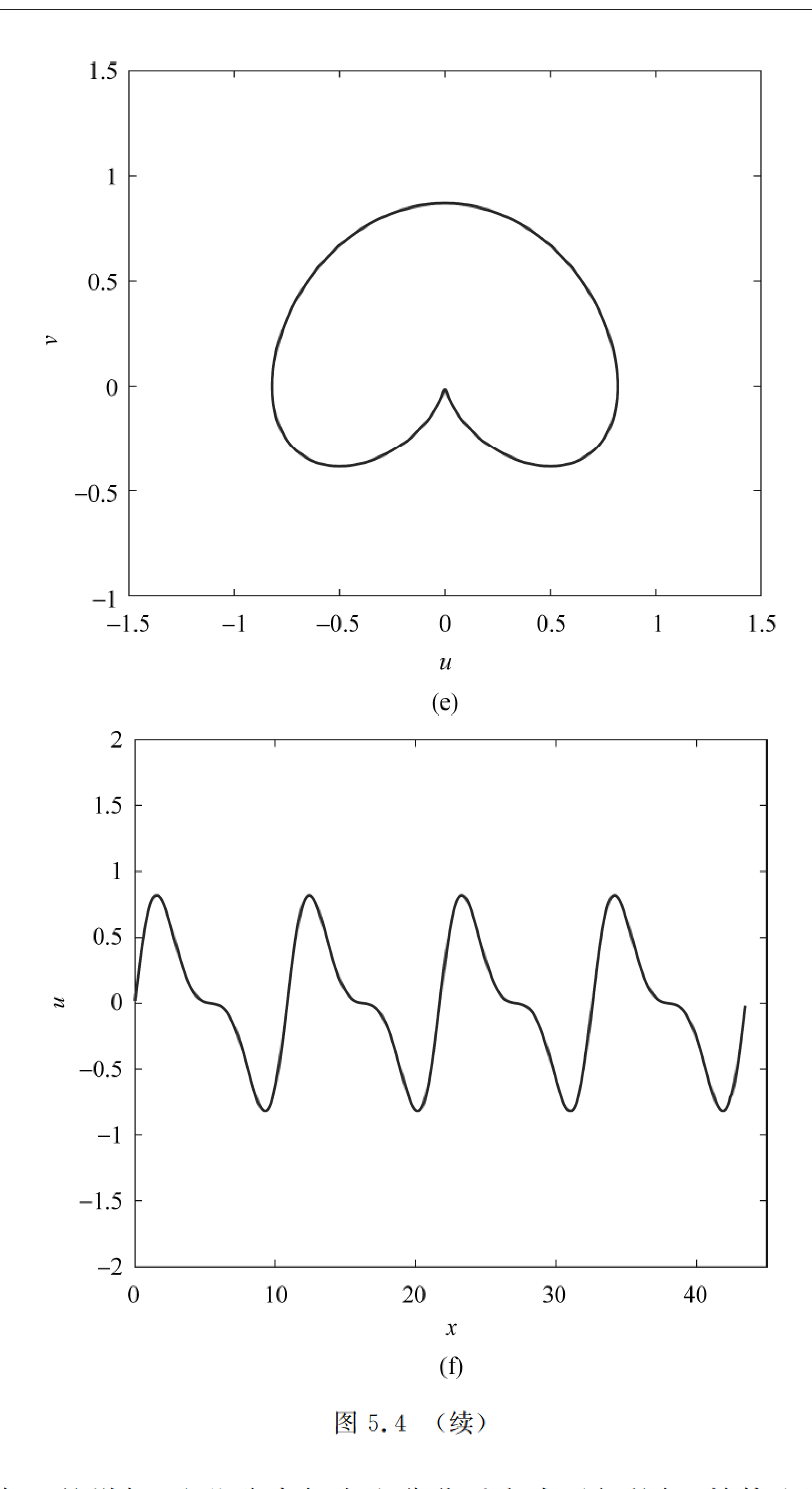


图 5.4 （续）

随着 L 的增加，这些稳态解发生分岔后变成了新的解，结构也随之变得越来越复杂。对于任何固定的周期 L 来说，稳态解的数目是有限的。当改变 L 的时候，我们也可以相应地变化 c 值，使得原先的轨道逐渐演化到它所在的新周期的对应轨道上去。

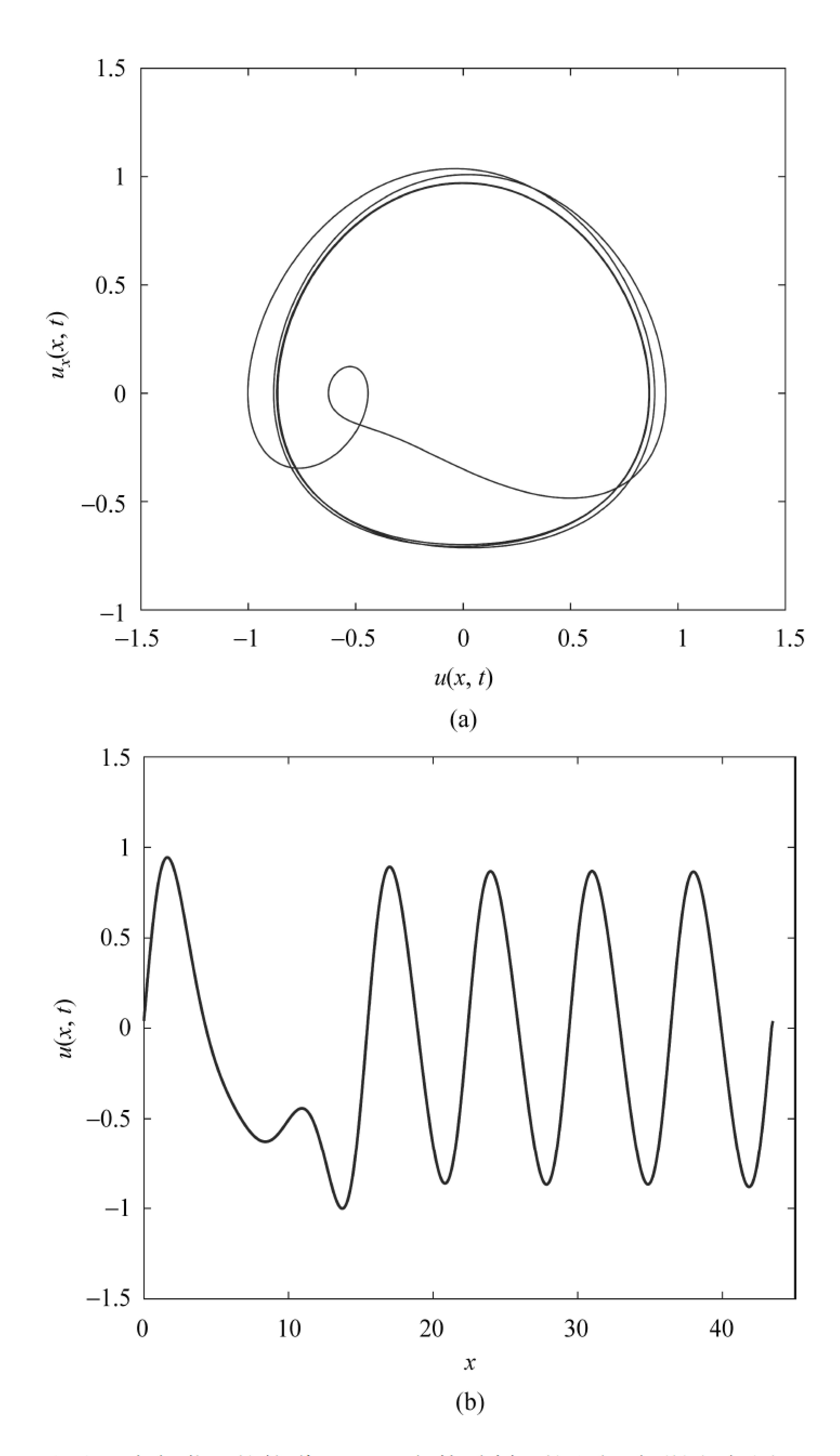


图 5.5　重要不动点附近的轨道 $u(x,t)$在某时刻 t 的空间波形图，与图 5.4 相对比

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

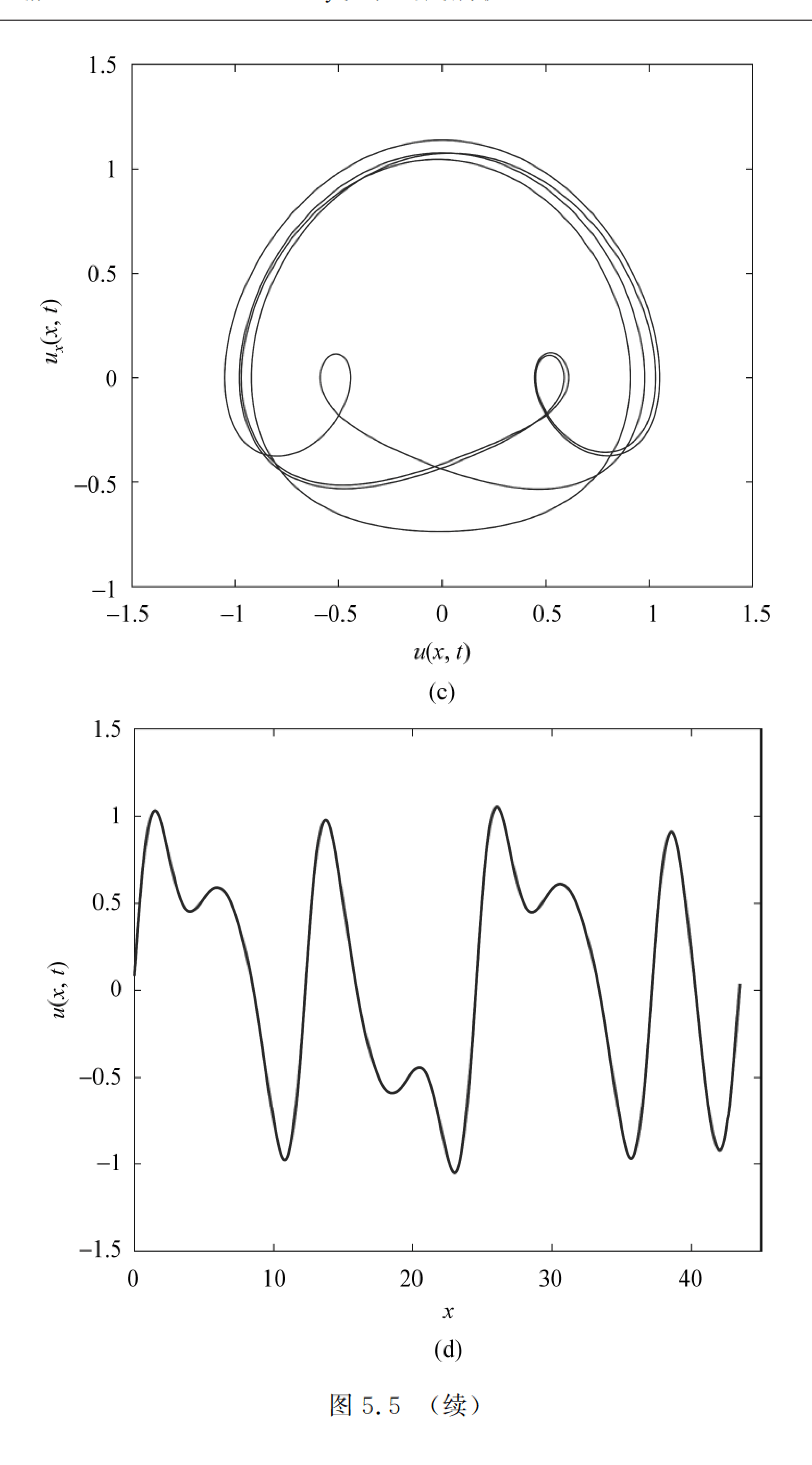


图 5.5 （续）

在图 5.4(c)里，轨道既绕着一对不动点 $\boldsymbol{c}_+$，$\boldsymbol{c}_-$ 整体旋转，也绕着每个不动点旋转。每绕一圈都在[0,43.5]区间的 u 波形图上出现一个极大值。绕着整体转对应着大的峰值，绕着一个不动点转对应着小的振荡。在图 5.4(e)里，不动点的轨道在(u,v,w)相空间里绕着两个不动点整体上转了四圈。所

以在图 5.4(f)[0,43.5]区间的 u 波形图上出现了 4 个极大值。图 5.2(a)展示了完整方程的混沌演化，在不同的时刻，$u(x,t)$存在着不同数目的极大值，我们估算出平均的极大值个数是 6.776。相应的基于 13 个不动点的波形图以及在图 5.3 中它们所占的权重，极大值的平均数近似等于 6.75。因此沿着一条轨道空间波形极大值的平均数可以近似地由这些不动点来决定，再次指明了这些不动点在渐近动力学中的相关性。

5.3　固定积分常值时静态 KS 方程的周期轨道

本节用变分法计算并详细讨论式(5-9)在给定 c 值时的不稳定周期轨道。这里选择参数 $c=0.40194$，因为系统在该参数下很可能表现出有意思的混沌动力学。我们找到了四条最简单的周期轨道，它们被用来组成单元，在此基础上建立了符号动力学，对所有找到的不稳定周期轨道加以分类。在这个特殊的参数 c 值下寻找和分类的方式是相当成功的，这种方法也可以用到其他不同的 c 参数值情况中。

5.3.1　初始化

在傅里叶模的表示下，不动点是无穷个代数方程$\{\dot{a}_k=0\}_{k=-\infty,\infty}$的解。数值计算时这些代数方程被截断成有限个多项式。我们发现对于变分法来说 16 个傅里叶模截断已经可以给出不错的初始圈猜想，用这种方法我们找到了一些短的周期轨道。想要寻找转了多圈的更长的周期轨道就需要更加复杂的初始猜想。我们用一些短的周期轨道作为组成单元，建立了近似的符号动力学，然后通过剪切以及拼接这些组成单元的轨道片段来构建长周期轨道的初始猜想圈。在静态 KS 方程里，这样的方式可以作为寻找长周期轨道相当好的系统的初始猜想。甚至我们手动把轨道连成一个粗糙的闭合圈，变分法也通常可以把轨道修补成一条真正的周期轨道。

5.3.2　拓扑的方式建立符号动力学分类周期轨道

经过多次尝试后我们找出了四条周期轨道，它们看起来很简单，或许可以组成单元来寻找其他长度的周期轨道。我们用“c_-”或“c_+”分别表示轨道

片段绕着左边或者右边的不动点转了一圈。当轨道绕着两个不动点整体转的时候,存在两种情况:一种情况如图 5.6(a)所示,这条轨道被标记为"a"轨道,而图 5.6(b)的轨道被标记为"b"轨道。通过这种方式,其他的轨道都可

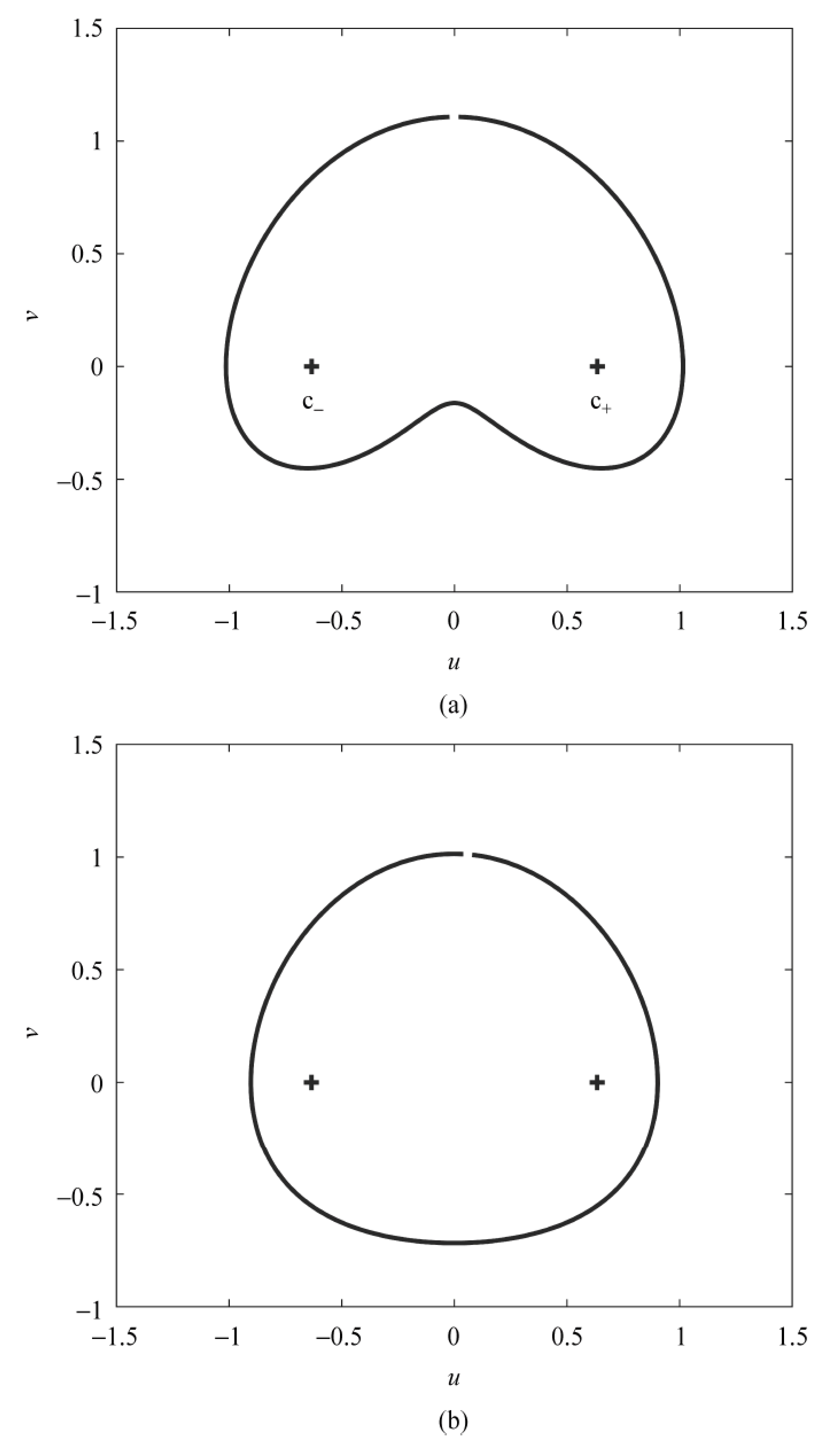


图 5.6　静态 KS 方程四条最简单的周期轨道,$c=0.40194$。"+"表示两个不动点 c_- 和 c_+ 的位置

(a) a 轨道;(b) b 轨道;(c) ac_- 轨道;(d) ac_+ 轨道

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

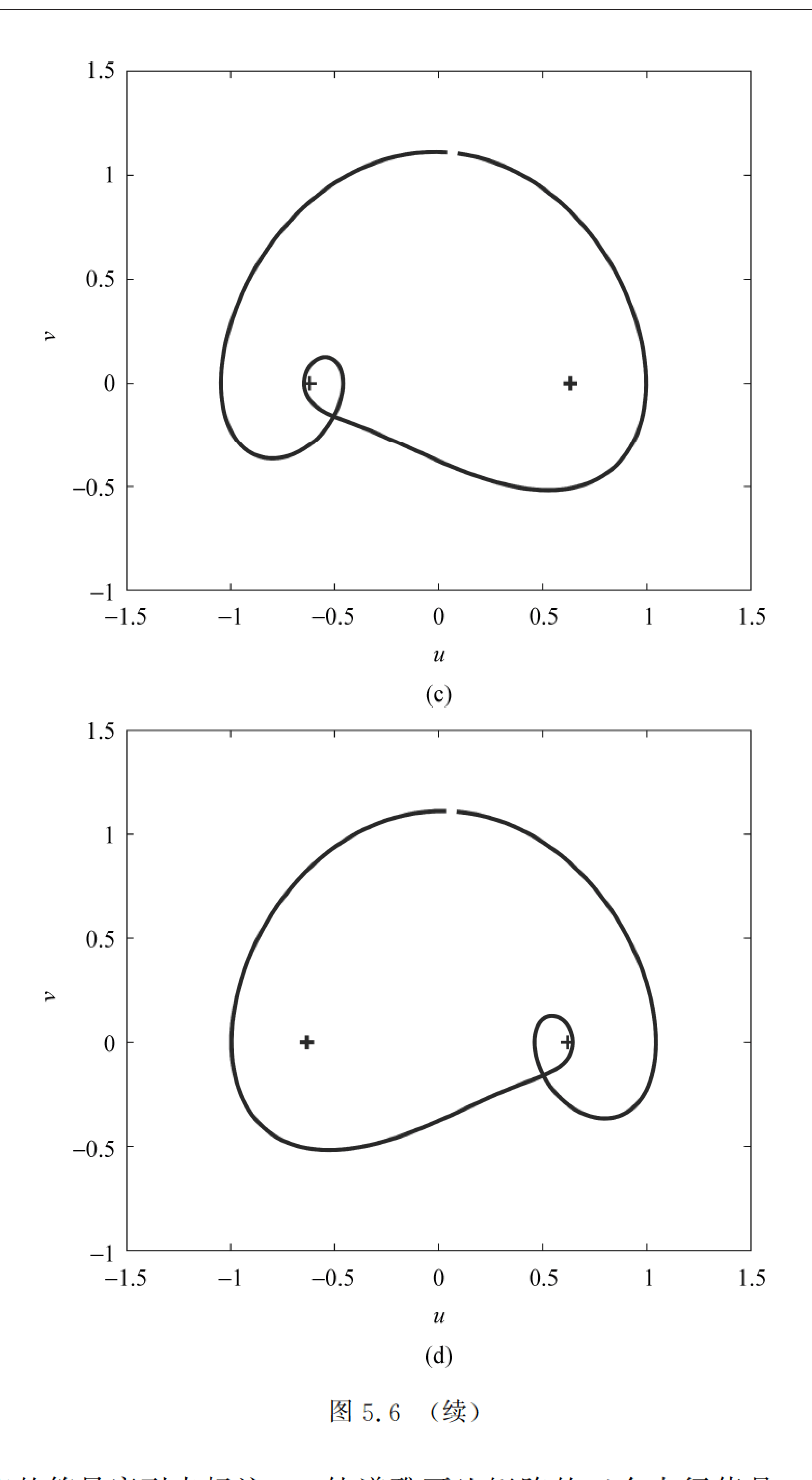


图 5.6　(续)

以用一定的符号序列来标注。a 轨道雅可比矩阵的三个本征值是 0.9999 和 −0.9259±0.3772i，b 轨道的三个本征值是 0.9999 和 0.9637±0.2668i。ac_{-} 轨道绕着左边的不动点转了一圈，然后绕整体转了一圈，如图 5.6(c)所示。

和它相对称的轨道，ac_+ 轨道如图 5.6(d)所示，它绕着右边的不动点转了一圈，然后绕整体转了一圈。ac_- 轨道的本征值是 0.9999 和 0.9979±0.0635i，ac_+ 轨道的本征值是 0.9999 和 0.9979±0.0635i。这些轨道的第一个本征值严格来说应该是 1，在这里可以作为数值计算精度的指示。

我们看到绕着左边不动点 c_- 或者右边不动点 c_+ 旋转的轨道只能和 a 轨道结合，而不能和 b 轨道结合成新轨道。所以不存在符号为“bc_-”或者“bc_+”的这种轨道。我们也没有找到“$ac_- c_+$”轨道，该轨道应该绕着左边的不动点转一圈，然后绕着右边的不动点转一圈，最后再绕着整体转一圈。我们同时也发现不存在绕一个不动点连续转两圈以上的轨道。更复杂的轨道可以通过这四条基本轨道的组合人为地构造出来。基于已经发现的这些周期轨道，可以经验地总结出如何建立符号动力学。从上面的讨论中可以看出，可以简化字母的定义为 $a=0$、$b=1$、$ac_-=2$ 和 $ac_+=3$。在符号动力学的帮助下，我们系统地找到了一定拓扑长度内的所有周期轨道。图 5.7 展示了拓扑长度 2 的四条周期轨道，它们对应的符号分别是 01、02、03 和 23。然而，我们发现 12 和 13 轨道是不存在的。

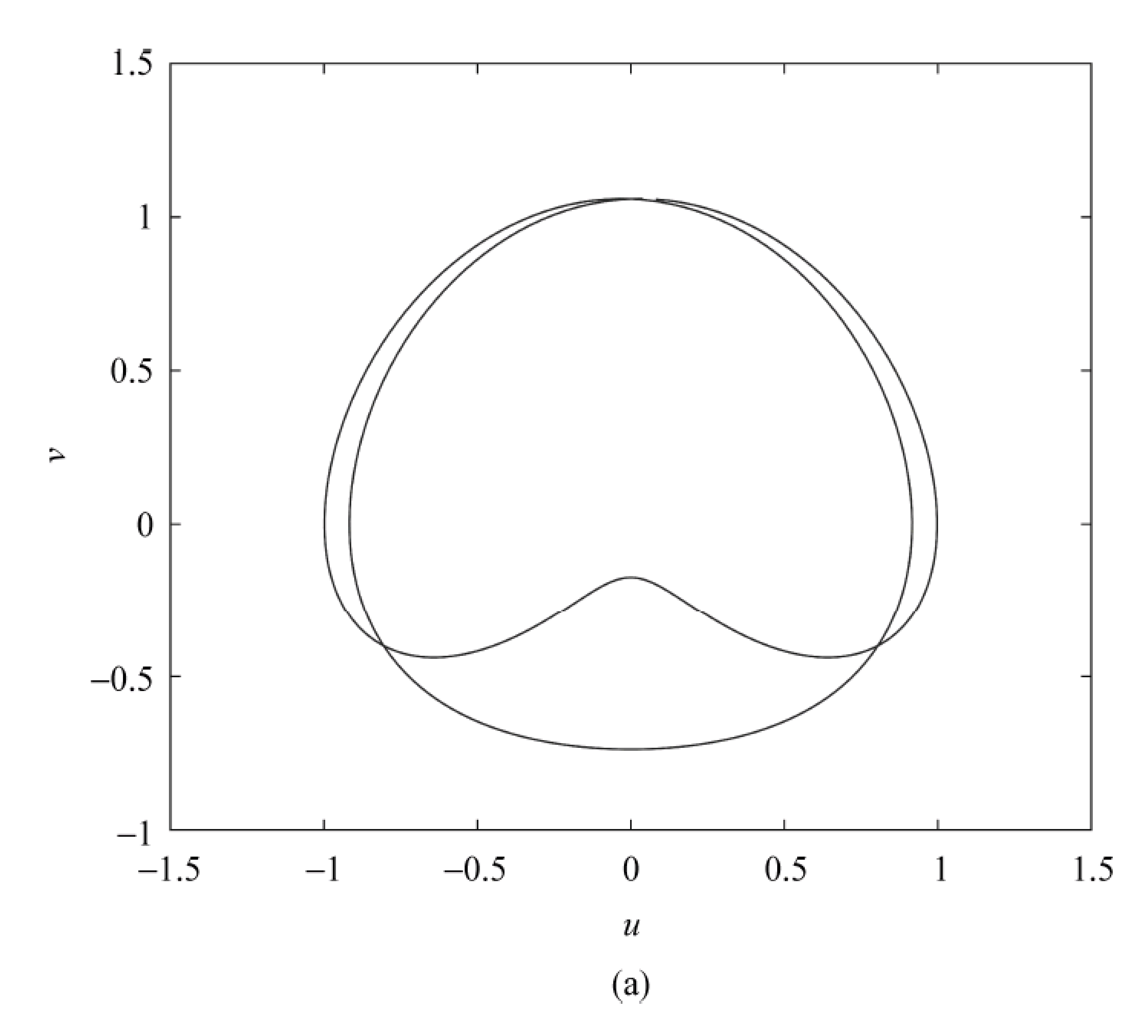


图 5.7　静态 KS 方程拓扑长度为 2 的周期轨道

(a) 01 轨道；(b) 02 轨道；(c) 03 轨道；(d) 23 轨道

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

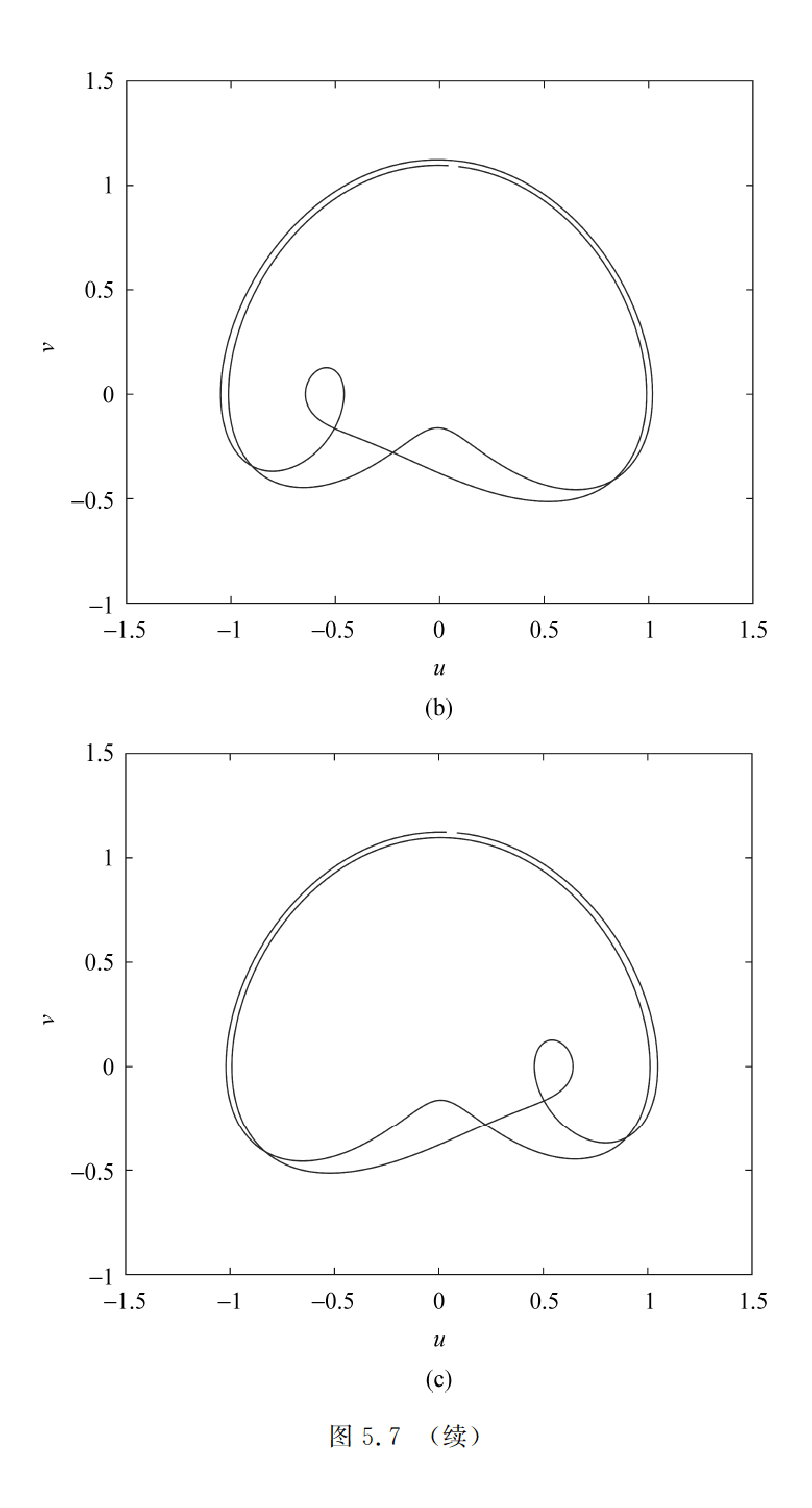


图 5.7 （续）

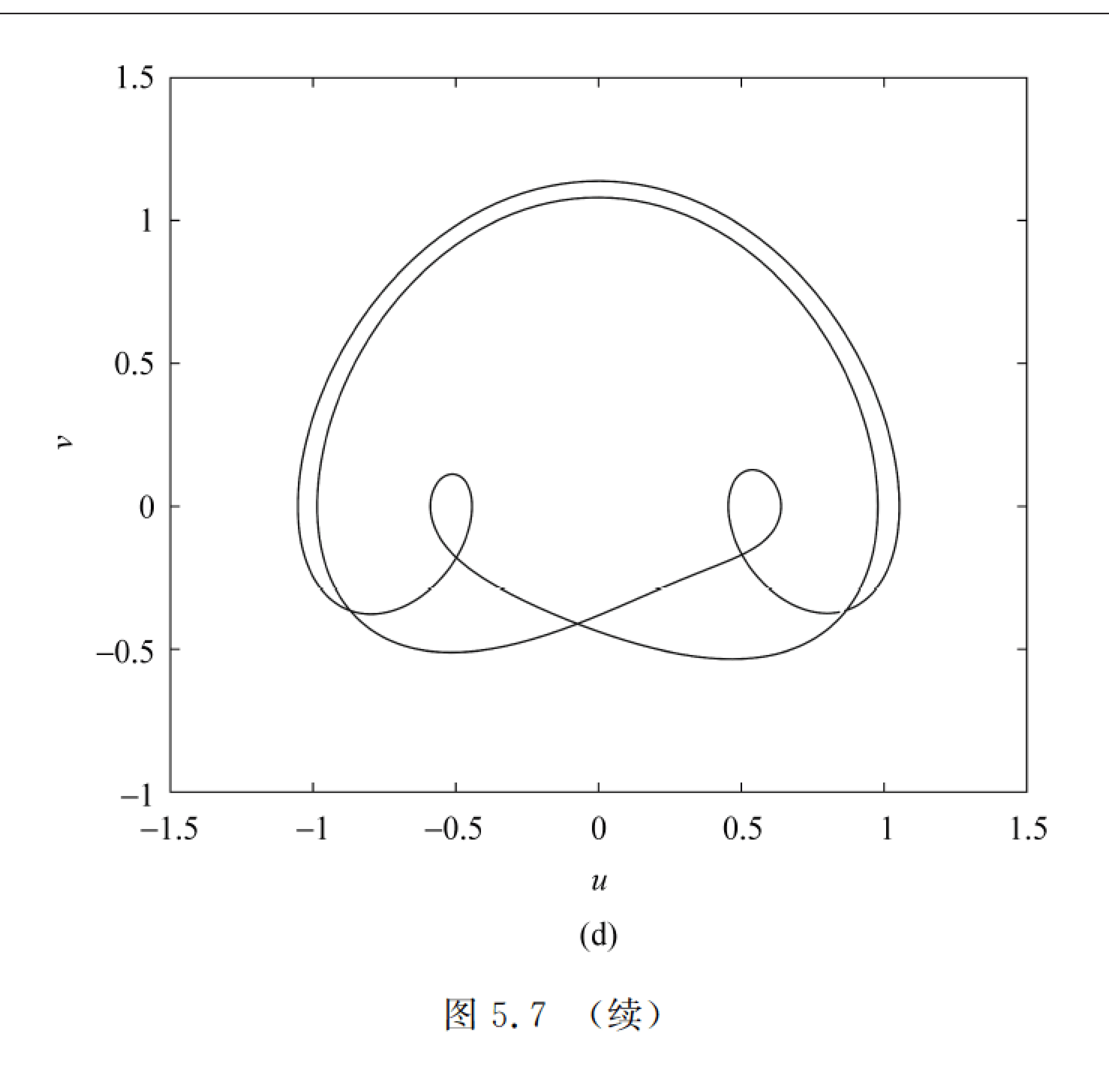


图 5.7 （续）

更长的轨道需要更多的点来描述，这会使寻找程序变慢。我们发现了 14 条拓扑长度为 3 的周期轨道，图 5.8 展示了其中的 4 条轨道。我们没有找到 012、013、221 和 331 这些轨道，理由很可能是因为 12 和 13 轨道是不存在的。

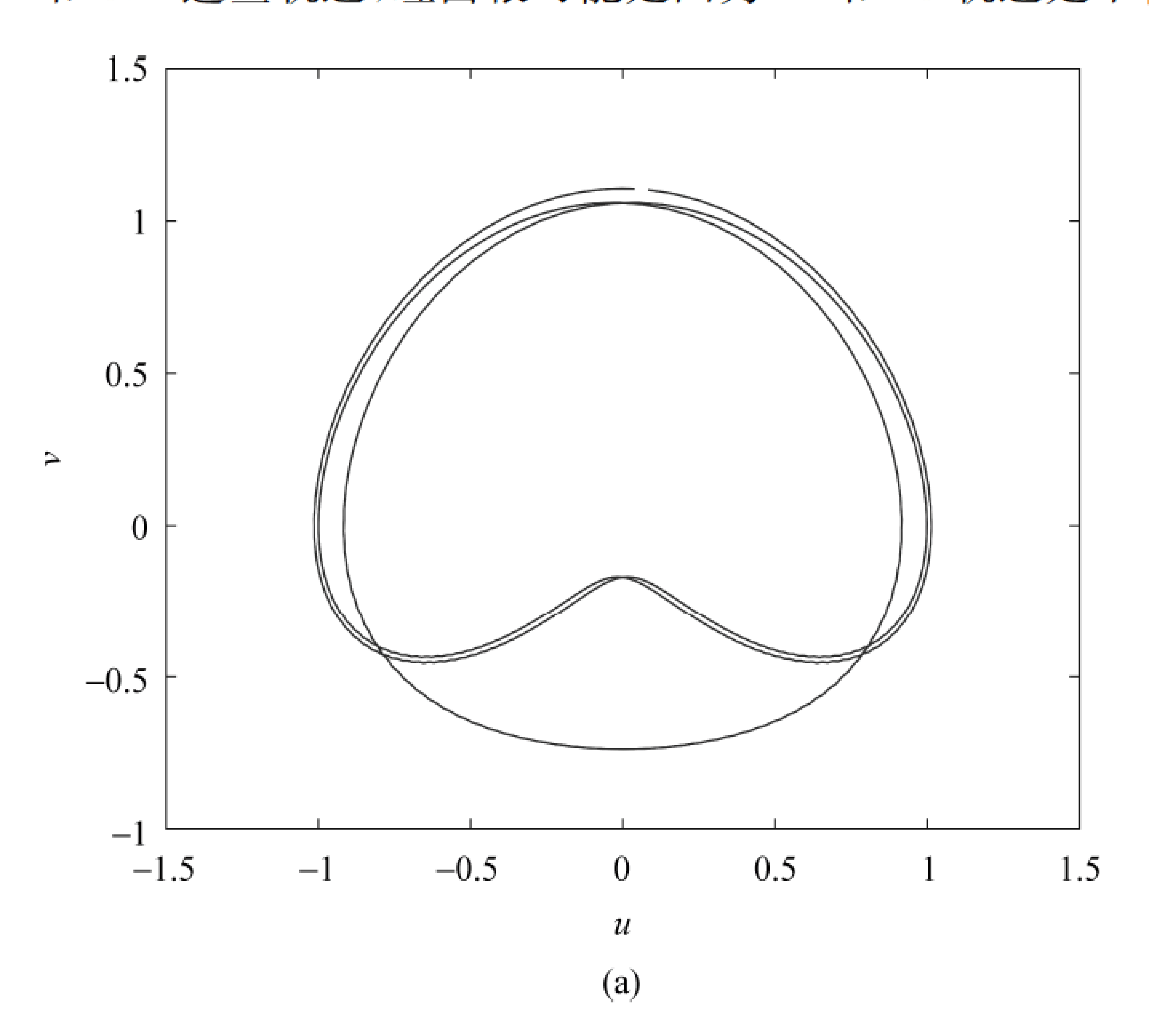
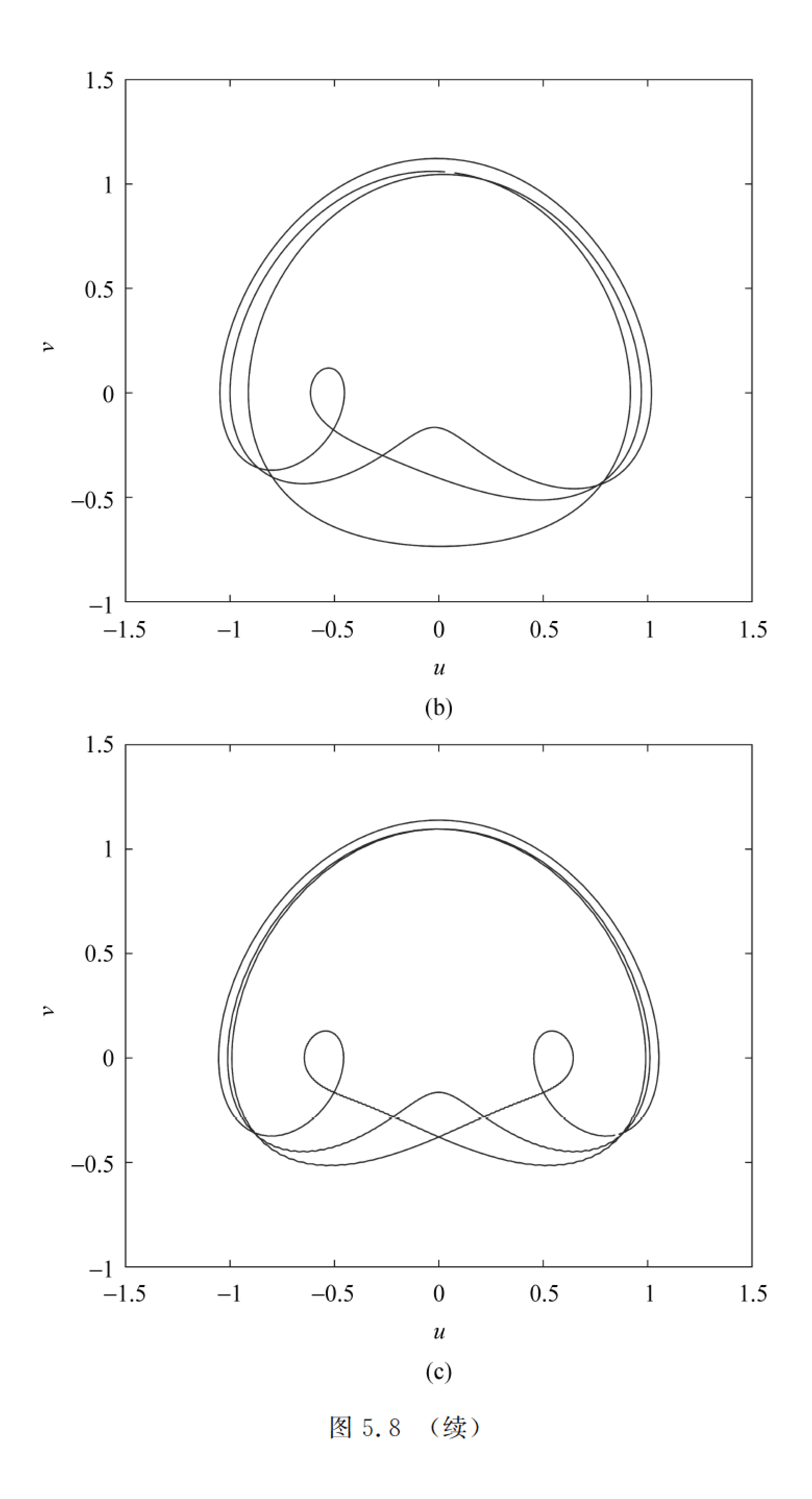


图 5.8 静态 KS 方程拓扑长度为 3 的 4 条周期轨道

(a) 001 轨道；(b) 021 轨道；(c) 032 轨道；(d) 123 轨道

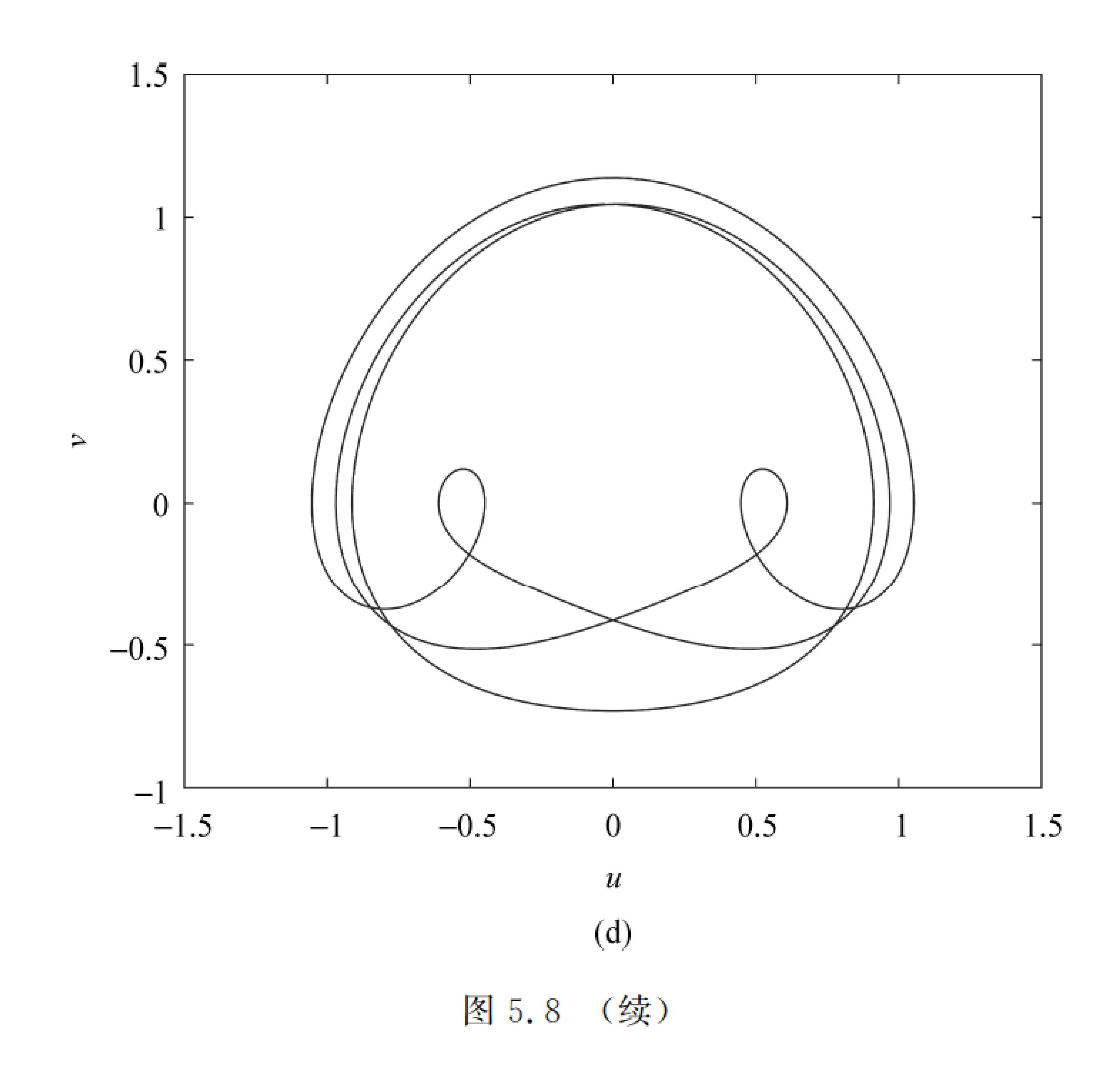
（阅读彩图请扫 158 页二维码）



(b)

(c)

图 5.8 （续）



(d)

图 5.8 （续）

我们一共找到了拓扑长度为 4 的 43 条周期轨道，图 5.9 展示了其中的 6 条。许多含有符号 12 或 13 的周期轨道都是不存在的，例如 0013、0012、0121 和 0131 等。通过拓扑长度 4 以内允许的符号序列，可以看出符号 121 和 131 被修枝了，符号 120 和 122 后面只能跟符号 3，130 和 133 后面只能跟符号 2，这几条就能比较好地概括出修改规则来。但是，上述仅仅是一个经验规律，对于长轨道来说很可能就不再准确了。此外，随着符号序列的增长更多不允许的符号序列很可能会出现。

我们一共找到了 65 条拓扑长度 4 以内的周期轨道，表 5.1 列出了所有的这些周期轨道，按照轨道的拓扑长度以及周期递增的顺序排列。表中的环绕数 N_1 表示在三维空间里，两条轨道之间互相绕在一起的圈数，它可以通过式(5-14)的高斯积分来计算：

$$Lk(K_1,K_2)=\frac{1}{4\pi}\int_{K_1\times K_2}\frac{\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|^3}\cdot(\mathrm{d}\boldsymbol{r}\times\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2) \tag{5-14}$$

其中 K_1 和 K_2 是两条没有交叉的可微曲线。环绕数在数学以及自然科学里有许多应用，例如量子力学、电磁学以及 DNA 超螺旋等方面的研究[129-131]。我们在表 5.1 中列出了其他周期轨道相对于 1 周期轨道的环绕数。

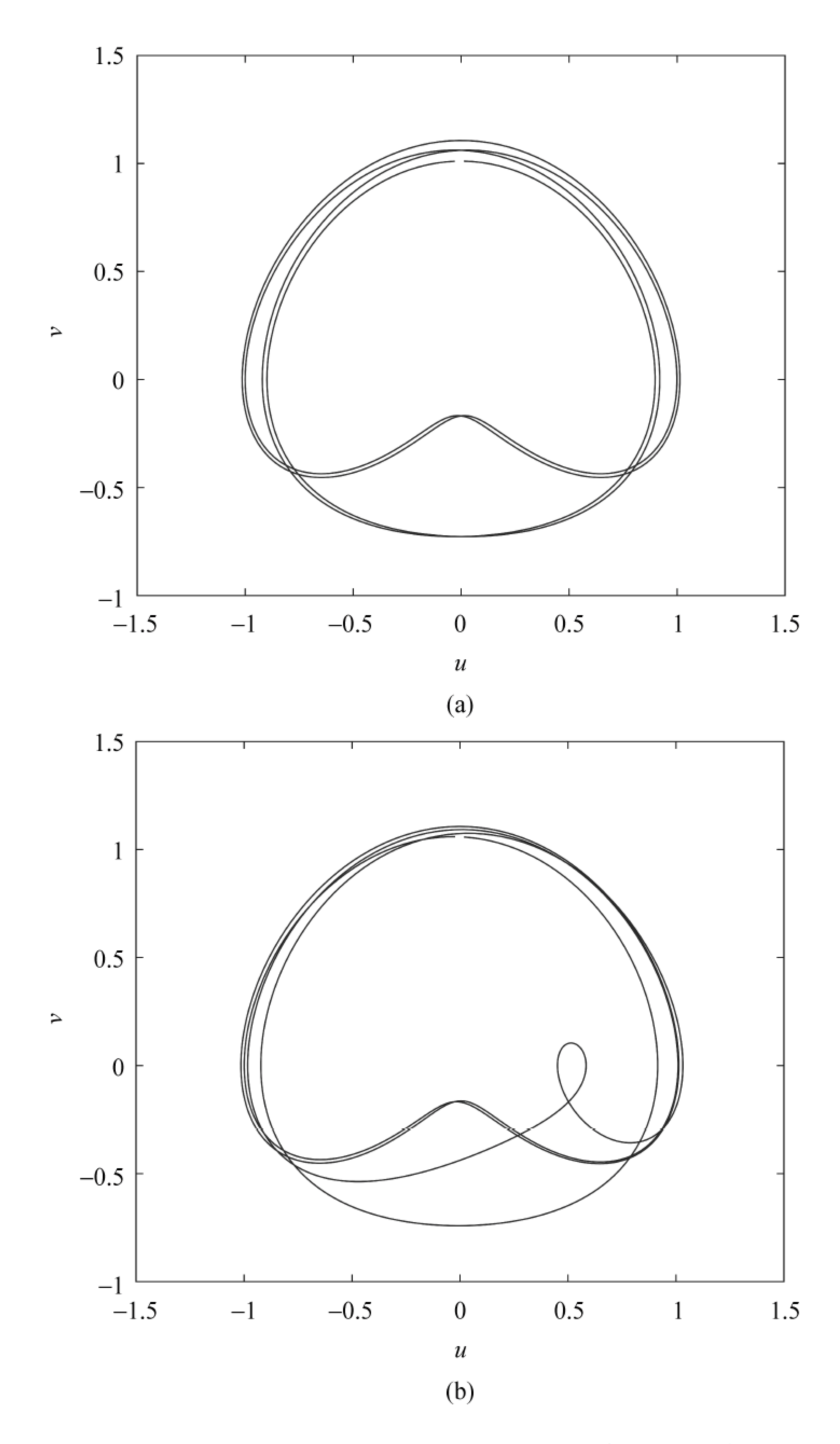


图 5.9　静态 KS 方程拓扑长度为 4 的 6 条周期轨道

(a) 0011 轨道；(b) 0103 轨道；(c) 0132 轨道；(d) 0021 轨道；

(e) 0203 轨道；(f) 0322 轨道

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

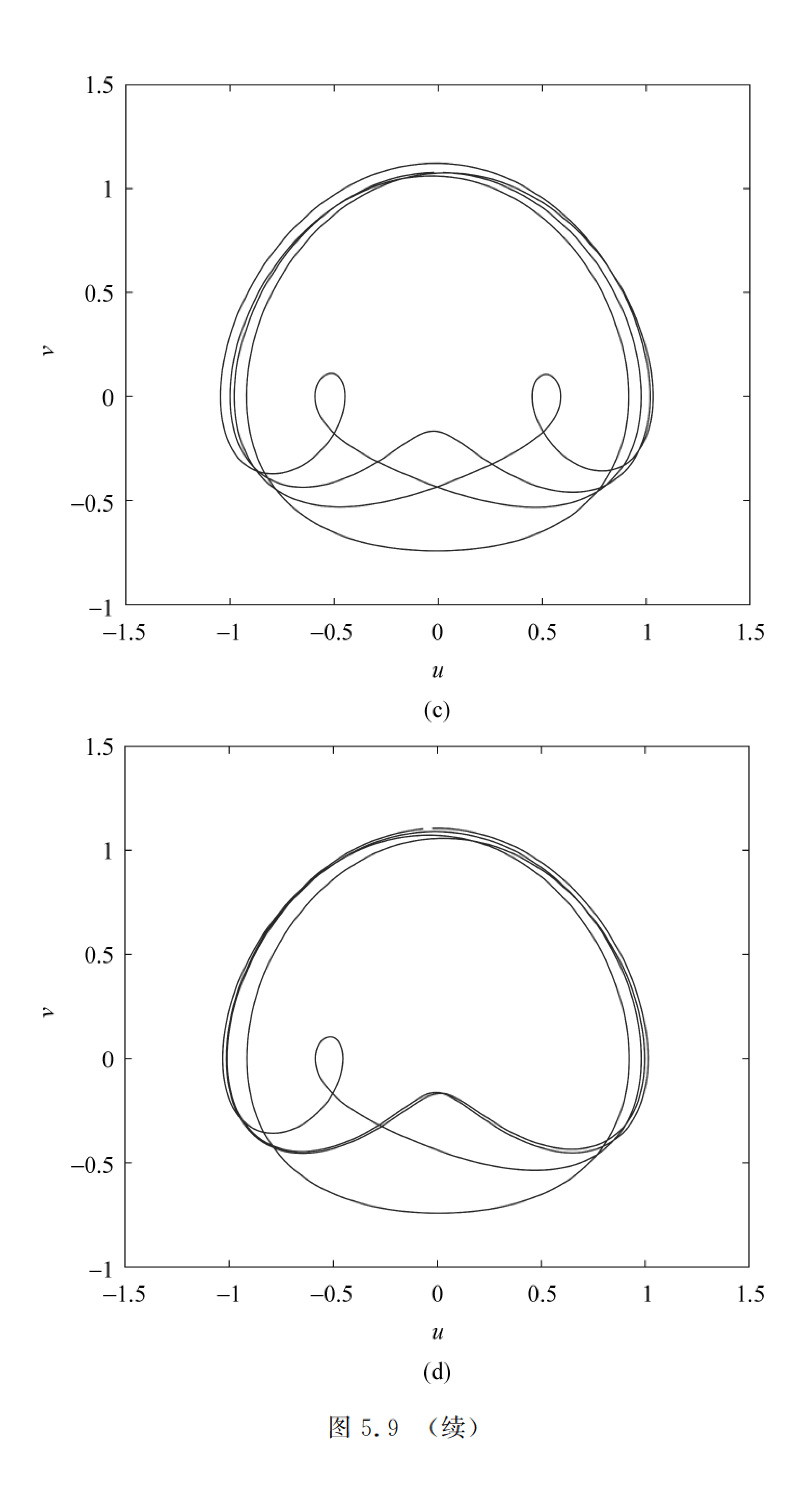


图 5.9 （续）

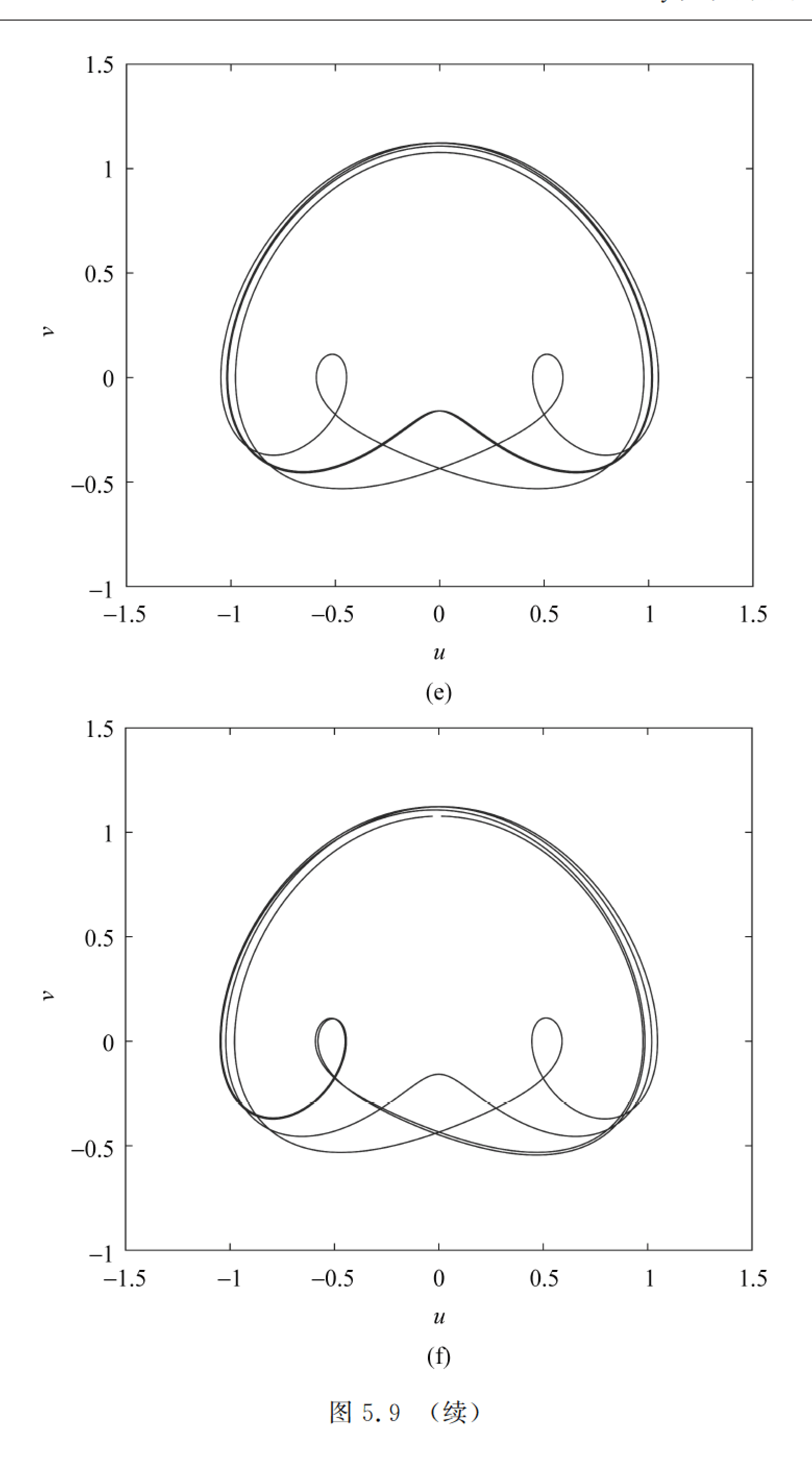


图 5.9 （续）

结合变分法,符号动力学能够用于初始化寻找更长的轨道。图 5.10 展示了拓扑长度为 13 的一条轨道,这样复杂的轨道如果没有符号动力学的指导并且在不知道修枝规则的情况下是很难找到的。符号动力学也可以很有趣地反映出系统的对称性。特别是前面的式(5-9)具有时间反演对称性,它表明

表 5.1　静态 KS 方程拓扑长度 4 以内的所有周期轨道

拓扑长度	符号序列	周期	环绕数
1	1	6.553460	—
	0	9.811907	1
	3	12.502813	1
	2	12.502820	1
2	01	16.268452	1
	02	23.712590	2
	03	23.712595	2
	23	26.422834	2
3	011	22.824175	2
	001	26.082080	2
	031	29.564512	2
	021	29.564544	2
	002	32.202914	3
	003	32.202961	3
	123	32.587135	2
	132	32.587931	2
	033	34.895416	3
	022	34.895424	3
	032	34.934960	3
	023	34.934964	3
	223	37.848212	3
	233	37.848644	3
4	0111	29.377401	3
	0011	32.637855	3
	0001	35.893873	3
	0211	35.926506	3
	0311	35.926546	3

续表

拓扑长度	符号序列	周期	环绕数
4	1132	38.500571	3
	1123	38.500642	3
	0102	38.707778	3
	0021	38.707823	3
	0103	38.707823	3
	0031	38.707889	3
	0331	41.395959	3
	0221	41.395992	3
	0123	41.702205	3
	0132	41.707541	3
	0231	41.707628	3
	0321	41.707978	3
	0002	42.014732	4
	0003	42.014733	4
	0213	42.552842	3
	0312	42.558382	3
	0033	44.707832	4
	0022	44.707850	4
	0023	44.783157	4
	0032	44.783916	4
	0203	45.002706	4
	1232	45.207226	3
	1323	45.207704	3
	1233	45.209285	3
	1322	45.209634	3
	1223	45.209784	3
	1332	45.209794	3

续表

拓扑长度	符号序列	周期	环绕数
4	0222	47.397829	4
	0333	47.397977	4
	0322	47.441876	4
	0233	47.442273	4
	0332	47.697520	4
	0223	47.697917	4
	0232	47.729380	4
	0323	47.729383	4
	2333	50.351041	4
	2223	50.351042	4
	2233	50.360451	4

注：表中列出了轨道的拓扑长度、符号序列、周期以及其他轨道相对于 1 轨道的环绕数。

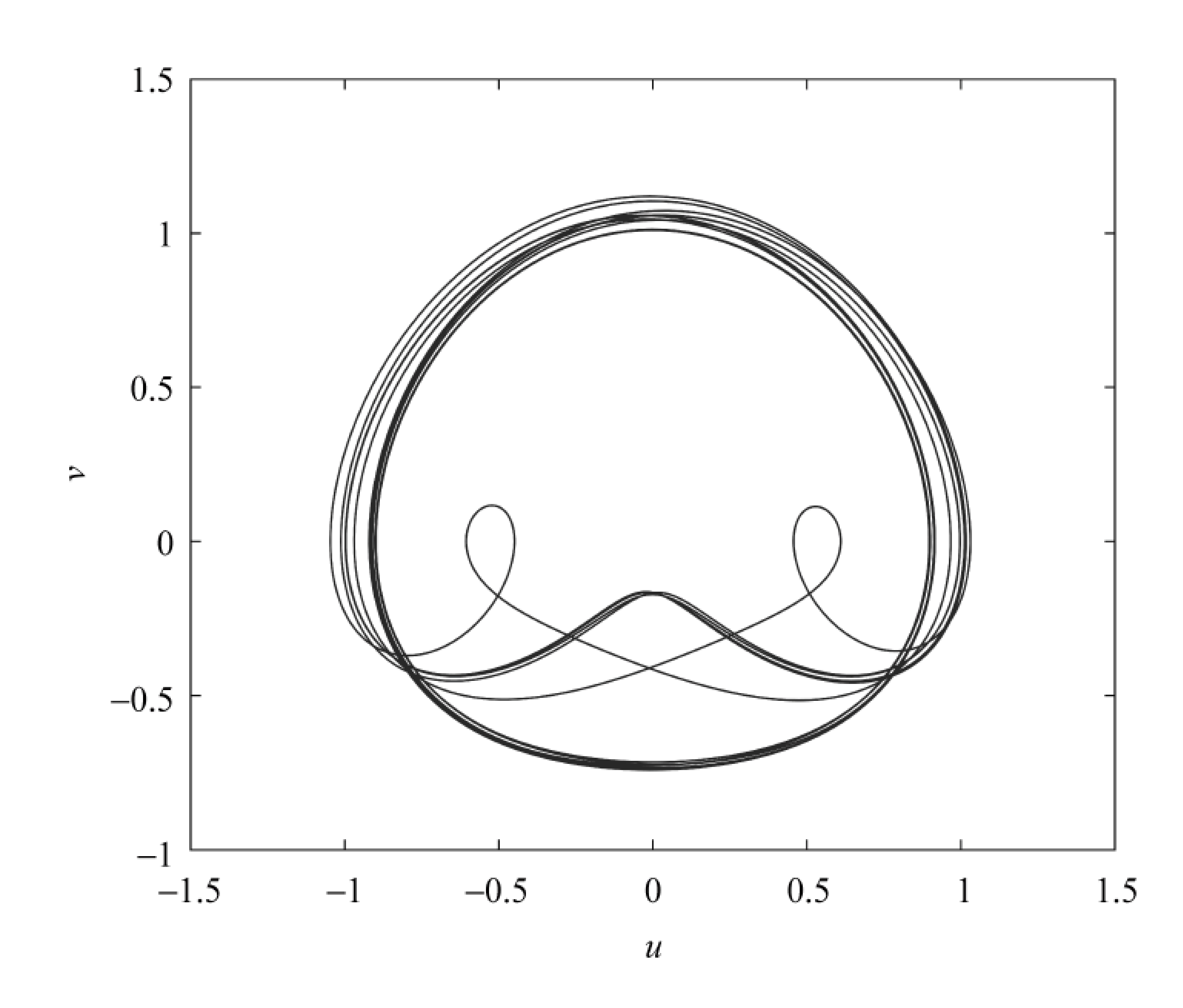


图 5.10　一条拓扑长度为 13 的周期轨道 0110110211031，
周期 $T=112.599520$，$c=0.40194$

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

基于组成单元的对称性，交换符号序列 2↔3 是等价的。例如，轨道 0033 有与之对应的 0022 轨道，而轨道 2233 则与它本身是共轭的。

5.3.3　庞加莱截面上的动力学

在找到了系统许多短的周期轨道后，我们现在研究庞加莱截面上的二维回归映射。根据轨道的分布情况，我们选择 $u=0$ 作为庞加莱截面。图 5.11 展示了已经找到的周期轨道和该庞加莱截面的交点。可以看到这些离散的点有一个对称的分布，这是由系统的时间反演对称性决定的。为了研究方便，我们把这些点分成四块小区域。左边点集中的这块区域记为 A 区，上边和下边点集中的区域分别记为 B 区和 C 区，右边剩下的部分记为 D 区。

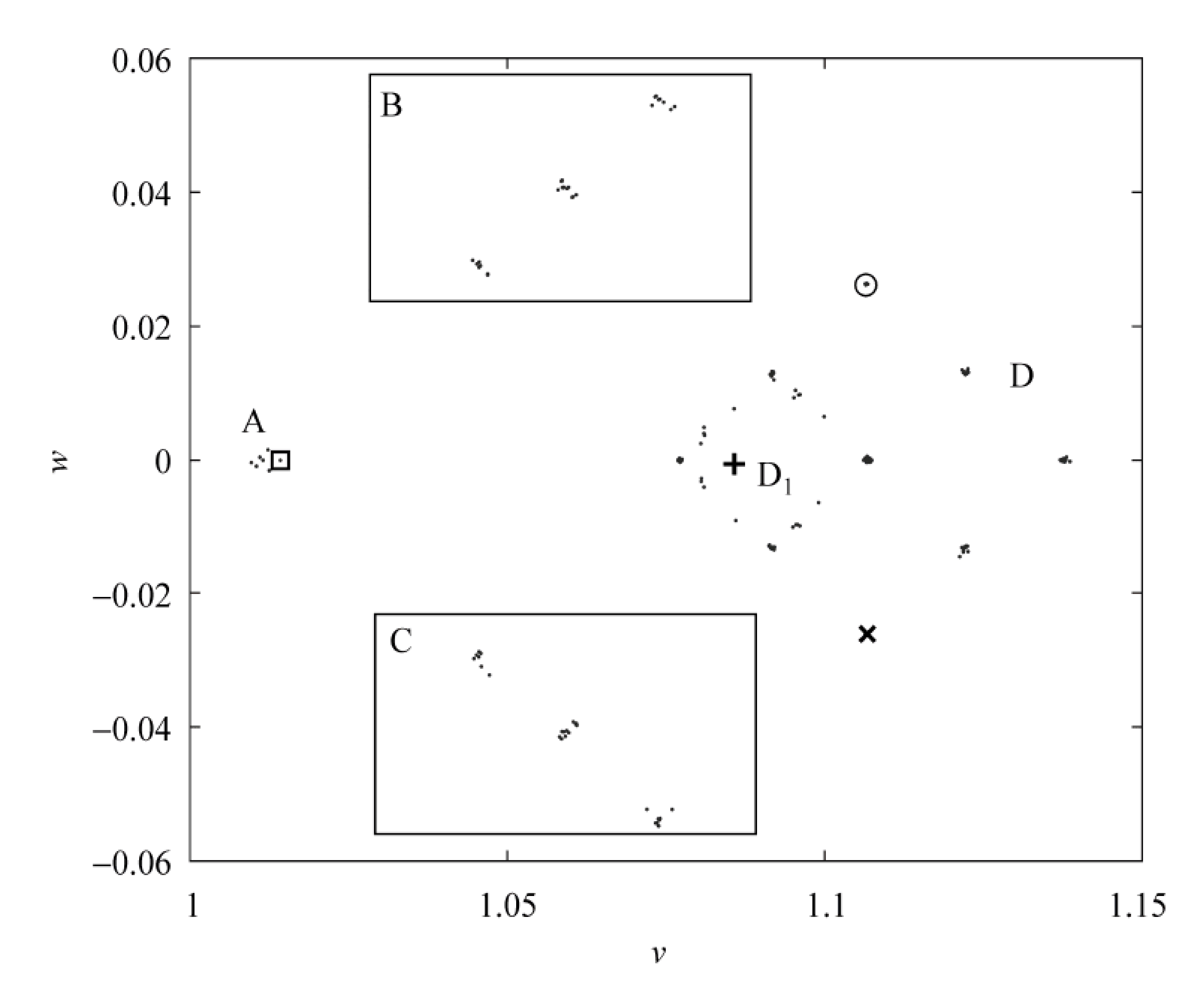


图 5.11　$u=0$ 庞加莱截面上的二维映射

图上标出了四条基本轨道 0(加号)，1(方框)，2(叉号)，3(圆圈)的位置。

我们把这些点分成四块小区域 A，B，C 和 D 加以研究点在这些区域间的跳跃规律

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

基于所有找到的周期轨道的动力学，这里我们列出了点在这些区域间跳跃的一些经验规律。

(1) 始于 A 区的点能够在下一步跳到 B 区或者 C 区，但是不可以直接跳到 D 区。要想跳到 D 区，必须经过 B 区或 C 区的过渡。

(2) B 区里的点下一步不能还停留在 B 区，对于 C 区里的点也有同样的规则。

(3) A 区里的点下一步可以留在 A 区，这条规则也适用于 D 区。B 区和 C 区的点下一步可以互相跳跃。

(4) D 区里的点频繁地落到 D 区左边的小区域 D_1。

在图 5.11 里，A 区的“方框”代表 1 轨道和截面的交点，D 区“圆圈”和“叉号”分别代表 2 轨道和 3 轨道与截面的交点，D_1 里的“加号”则代表 0 轨道。

接着，通过研究这四块区域里对应的符号序列，我们发现了一些经验的规则。例如，A 区点的符号序列的第一个符号都是 1，在 2 轨道“叉号”的周围，点的符号序列的第一个符号都是 2，3 轨道附近都是 3。在 D 区最左边和最右边的小区域，点的第一个符号只能是 2 或者 3。在小区域 D_1 的最上方，第一个符号只能是 0 或者 3，而 D_1 的最下方，第一个符号只能是 0 或者 2。

上面提到的规则(1)～规则(4)有些类似于“选择定则”，这或许可以用来解释为什么许多带有符号序列 12 或者 13 的轨道都被修枝了。假如存在这样的一个符号序列，对应的周期轨道在庞加莱截面上的点将违背上面的规则。我们还看到，区域 A 像是和 D 区中心的那小块区域有着某种相似性，在那里点很密集，呈现出了一定的旋转对称性。如果在 A 区域附近选择一个点作为初始点，用 5 阶变步长龙格-库塔法演化一段时间后，会发现这些点比在其他位置初始的点要停留更长的一些时间，如图 5.12 所示。所有上面提到的经验规则都是根据图 5.11 中有限数目的点表现出来的。然而我们很难定义一个严格的边界，所以对于长轨道来说，当截面上的点变得更多时，上述说法不一定精确。

如同数值积分时看到的那样，庞加莱截面上两个靠得很近的点的命运是很不一样的，这表明轨道间分开得很快。KS 方程庞加莱截面上的吸引子是很薄的，可以近似看成是一维的，因此可以由回归映射方便地建立符号动力学[18]。但是对于式(5-9)的系统来说，由于流的测度守恒性质，静态 KS 方程在庞加莱截面上的动力学规律就很复杂，不能通过一维符号动力学来描述。为此我们不得不引入二维映射的符号动力学，这就需要更多的符号序列，通常很难建立起来。所以基于整条轨道的结构利用拓扑的方式进行分类的方法更加有效。

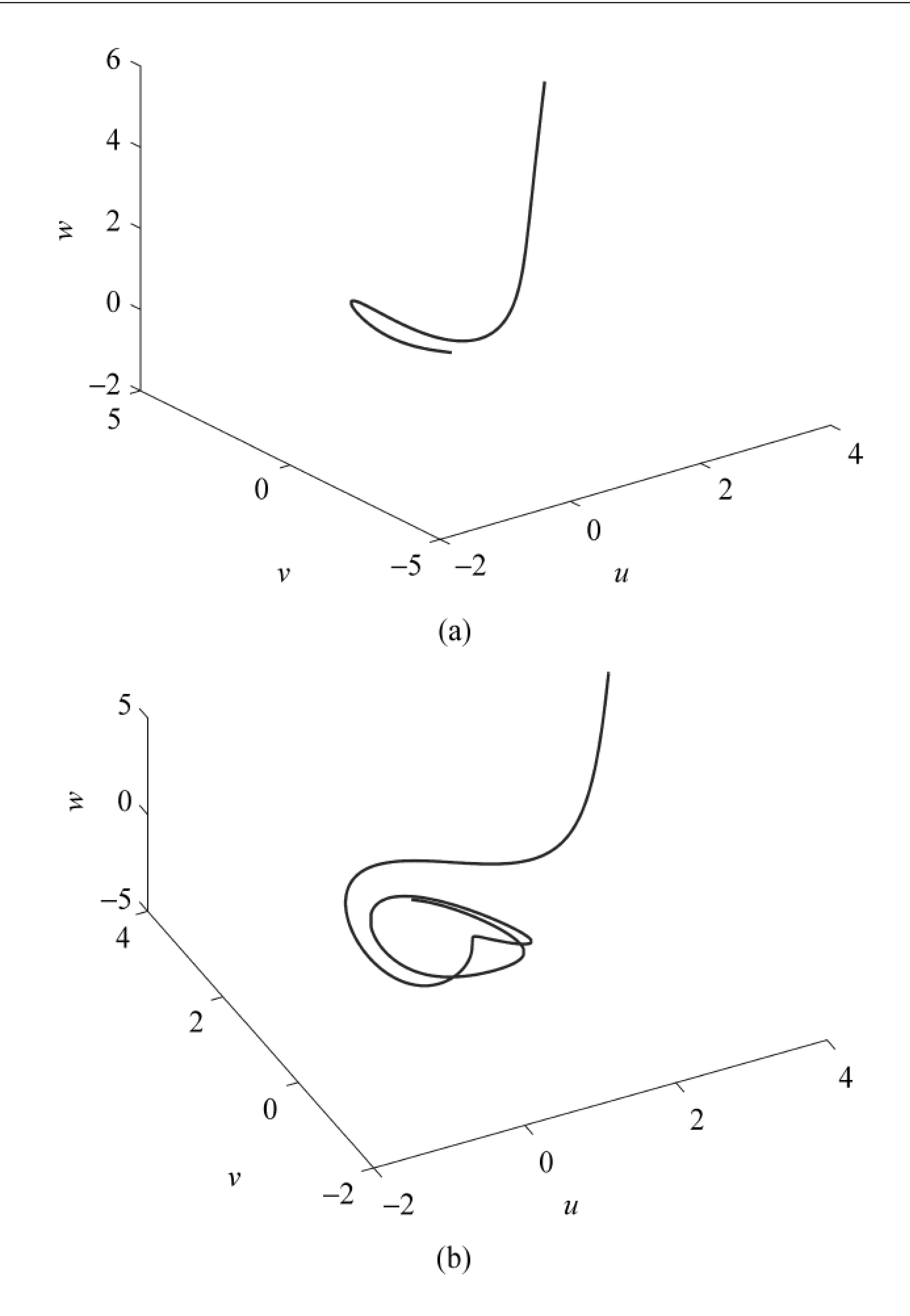


图 5.12　系统轨道长时间的演化情况

(a) 一个初始点(0.01,−1.02,0.20)演化很短的时间就快速逃逸了；

(b) 另一个初始点(0.00,1.01,0.00)则有着较长的逃逸时间

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

我们也计算了 $c=0.3521$ 时式(5-9)对应的周期轨道,同样可以利用上面提到的方法以四条轨道作为组成单元对全部轨道加以分类。我们在表 5.2 中列出了拓扑长度 3 以内所有 21 条周期轨道的迭代序列以及对应的周期。通过计算发现许多符号动力学允许的轨道同样并不存在,例如符号序列 12、13 和 032 等对应的轨道,它们可能在取其他的积分常数值时存在,例如 032 轨道在 $c=0.40194$ 时就是存在的。

表 5.2　静态 KS 方程的部分短周期轨道，$c=0.3521$

拓扑长度	符号序列	周期
1	0	10.09801
	1	6.510960
	2	12.02472
	3	12.02472
2	01	16.51308
	02	22.16208
	03	22.16210
	23	24.24077
3	001	26.61490
	002	32.26014
	003	32.26015
	011	23.02645
	022	34.18716
	033	34.18728
	021	28.78859
	031	28.59381
	023	34.21252
	123	30.93475
	132	30.70259
	223	36.26723
	233	36.26696

5.4　基本轨道的分岔情况

当取小的 L 值时，式(5-9)系统的动力学以及分岔序列在解析和数值上都有大量的研究工作[132-134]。本节研究当改变参数 c 时，四类基本轨道的分岔情况。首先研究 0 轨道随着 c 值变化的情况。在我们的计算中，前一个 c 值计算出的 0 轨道能够被用于下一个 c 值寻找时的初始圈猜想。因此可以让 0 轨道连续形变，直到 c 取极限值时 0 轨道不再存在。表 5.3 列出了 0 轨道存在的 c 值范围，以及对应的轨道周期。图 5.13(a)展示了 0 轨道 7 个不同的 c 值

情况下的连续形变。表 5.3 也列出了 1 轨道存在的 c 值范围及其对应的周期。图 5.13(b)展示了 1 轨道 7 个不同的 c 值情况下的连续形变。

表 5.3　不同 c 值情况下,0 轨道的周期(左)与 1 轨道的周期(右)

c	周期	c	周期
0.00025	12.563198	0.00078	6.285198
0.00078	12.565347	0.00894	6.287654
0.00594	12.571942	0.07194	6.322261
0.06194	12.494886	0.19194	6.394647
0.10194	12.057179	0.27194	6.449484
0.20194	11.136049	0.35194	6.510754
0.30194	10.410827	0.36312	6.520013
0.40194	9.811907	0.40194	6.553460
0.50120	9.293629	0.55194	6.710593
0.55440	9.034459	0.70194	6.959582
0.60194	8.807797	0.79194	7.314976
0.68123	8.425320	0.80000	7.424367
0.75194	8.039660	0.80080	7.446768
0.79194	7.722342	0.80160	7.489183
0.80167	7.509136	0.80167	7.506754

c 值变化时系统经历了一系列的分岔[135]。当 $0.00078<c<0.80167$ 时,0 轨道和 1 轨道都是存在的;$c=0.80167$ 时,0 轨道和 1 轨道发生了碰撞;$c>0.80167$ 时,它们又一起消失了。所以系统在 $c=0.80167$ 处经历了一次鞍结分岔。我们也在分岔点 $c=0.80167$ 附近计算了 0 轨道和 1 轨道的雅可比矩阵,算出了它们的本征值分别是 1.0000 和 $0.999988\pm0.0049i$,以及 1.0000 和 $0.999989\pm0.0047i$,本征值都和 1 很接近,这也证实了确实发生了一次鞍结分岔。

当 $c=0.00078$ 时,0 轨道和 1 轨道看起来形状都很简单,但 0 轨道的周期近似是 1 轨道的 2 倍,因此在 $c=0.00078$ 附近发生了逆倍周期分岔。我们也计算了这两条轨道的雅可比矩阵,0 轨道的本征值是 1.0000 和 $0.999955\pm0.0095i$,1 轨道的本征值是 1.0000 和 $0.999958\pm0.0091i$。该分岔与文献里提到的茧分岔有关[136]。

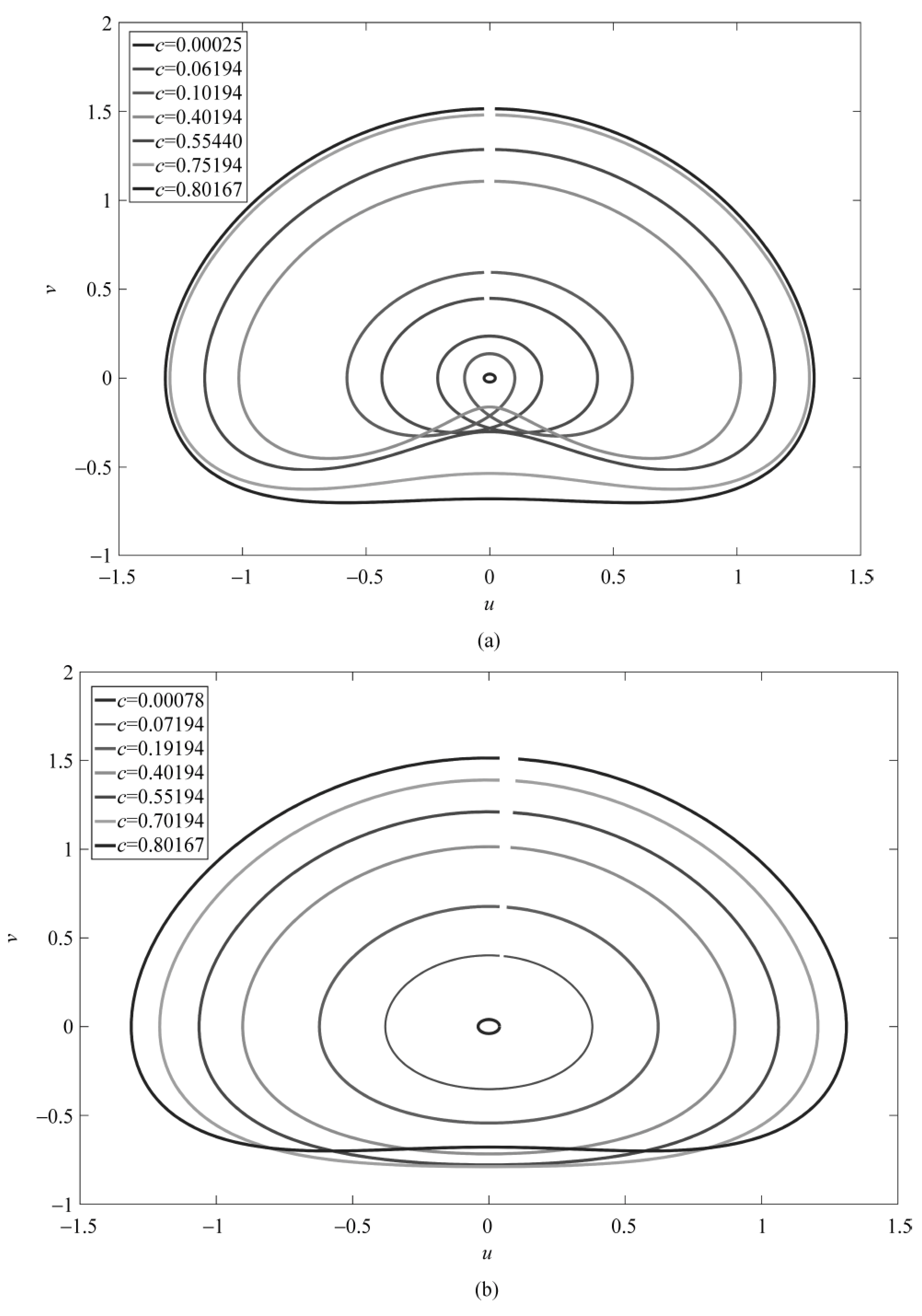


图 5.13　静态 KS 方程 0 轨道和 1 轨道的连续形变图

(a) 0 轨道 7 个不同 c 值情况下的连续形变；(b) 1 轨道的情况，注意到当 $c=0.00078$ 以及 $c=0.80167$ 时，两条轨道的形状很相近

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

在 $c\to 0^+$ 的极限条件下，可以采取微扰技术来分析式(5-9)的动力学性质[104]。简单起见，令 $c=\varepsilon^2,\varepsilon>0$。对变量作如下变换：

$$(u,v,w)\to(\varepsilon u,\varepsilon v,\varepsilon w) \tag{5-15}$$

式(5-9)变为

$$\begin{cases} u_x = v \\ v_x = w \\ w_x = -v+\varepsilon(u^2-1) \end{cases} \tag{5-16}$$

在零级近似下，式(5-16)是线性的，该微分方程的通解为

$$\begin{cases} u = \tilde{v}\sin x - \tilde{w}\cos x + \tilde{u} \\ v = \tilde{v}\cos x + \tilde{w}\sin x \\ w = -\tilde{v}\sin x + \tilde{w}\cos x \end{cases} \tag{5-17}$$

式中，$\tilde{u}$、$\tilde{v}$ 和 $\tilde{w}$ 是常数，它们在进行微扰分析时用作因变量。把式(5-17)代入式(5-16)可得到关于 $\tilde{u}$、$\tilde{v}$ 和 $\tilde{w}$ 的方程

$$\begin{cases} \tilde{u}_x = \varepsilon(u^2-1) \\ \tilde{v}_x = -\varepsilon\sin x(u^2-1) \\ \tilde{w}_x = \varepsilon\cos x(u^2-1) \end{cases} \tag{5-18}$$

多尺度平均微扰方法可以用来分析式(5-18)对应的系统。例如，作如下的变量处理：

$$\tilde{u} = \bar{u}+\varepsilon u_1(\bar{u},\bar{v},\bar{w},x)+\varepsilon^2 u_2(\bar{u},\bar{v},\bar{w},x)+\cdots \tag{5-19}$$

对于另外两个变量 $\tilde{v}$ 和 $\tilde{w}$ 来说也有类似的表达式。这里为了简洁，采用 u、v 和 w 来代替 $\bar{u}$、$\bar{v}$ 和 $\bar{w}$，展开到 ε 的三阶项有：

$$\begin{cases} u_x = \varepsilon\left[\frac{1}{2}(v^2+w^2)+u^2-1\right]+\varepsilon^3\left[4u^4+\frac{7}{4}(v^2+w^2)-\right. \\ \qquad \left.\frac{271}{288}(v^2+w^2)^2+\frac{1}{8}u^2(-32+9(v^2+w^2))\right] \\ v_x = -\varepsilon uv+\frac{\varepsilon^2}{24}(36u^2w-w^3-wv^2)+ \\ \qquad \frac{\varepsilon^3}{36}[153u^3v-9uv-41uv(v^2+w^2)] \\ w_x = -\varepsilon uw-\frac{\varepsilon^2}{24}(36u^2v-v^3-vw^2)+ \\ \qquad \frac{\varepsilon^3}{36}[153u^3w-9uw-41uw(v^2+w^2)] \end{cases} \tag{5-20}$$

令 $\rho=v^2+w^2$,可得到一个二维动力系统：

$$\begin{cases} u_x=\varepsilon\left(\frac{1}{2}\rho+u^2-1\right)+\varepsilon^3\left[4u^4+\frac{7}{4}\rho-\frac{271}{288}\rho^2+\frac{1}{8}u^2(-32+9\rho)\right] \\ \rho_x=-2\varepsilon u\rho+\frac{\varepsilon^3}{18}(153u^3\rho-9u\rho-41u\rho^2) \end{cases} \tag{5-21}$$

式(5-21)的二维自洽动力系统具有时间反演对称性 $x\to -x$、$u\to -u$ 和 $\rho\to\rho$。展开到 ε^2 的高阶无穷小量，式(5-21)对应的相空间结构如图 5.14 所示。可见小 c 值时相空间的结构是极为复杂的,同时存在着周期轨道和结构稳定的异宿轨道。此外,相空间中包含有三个不动点：p_1、p_2 和 p_3,其中 p_1 和 p_2 对应着式(5-9)的两个不动点,它们之间连接着两条异宿轨道,在这两条异宿轨道所包围的区域里包含有若干条周期轨道。而不动点 p_3 则对应着当 c 值在 0 附近变化时产生的新周期轨道。该轨道对于小的 $c>0$ 总是存在的，并具有如下形式：

$$u=-\sqrt{2}\varepsilon\sin(\Omega x)+\frac{\varepsilon^2}{3}\sin(2\Omega x)+\cdots \tag{5-22}$$

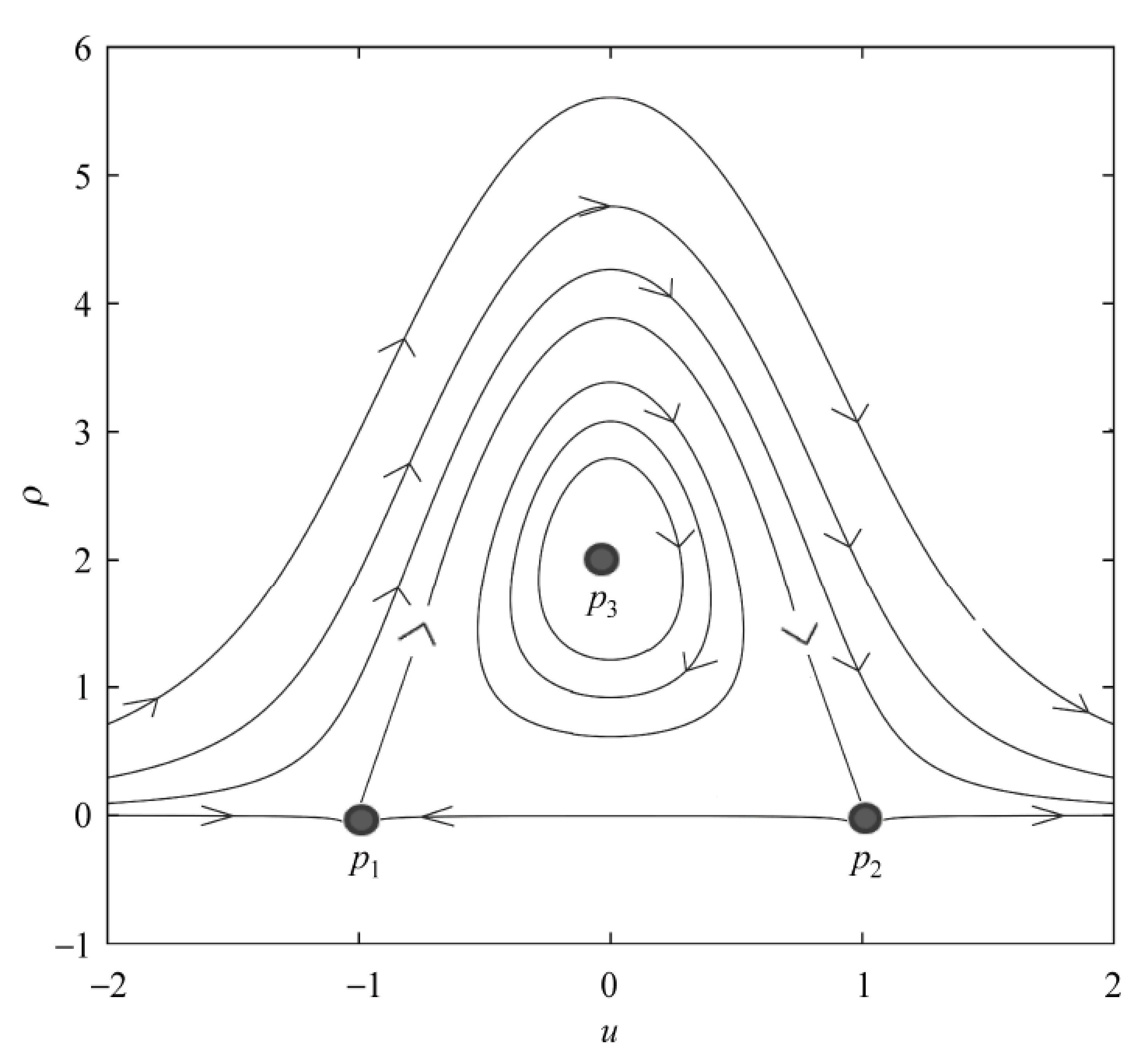


图 5.14　式(5-21)的相图

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

其中 $\Omega=1-\varepsilon^2/6+\cdots$，它的值是接近于 1 的，从而有 $T_p\approx 6.28$，这和表 5.3 列出的结果一致。

我们接下来研究 2 轨道。表 5.4 列出了轨道的演化情况，图 5.15(a)展示了 7 个不同的 c 值情况下 2 轨道的连续形变。我们发现了另外一条轨道，在 $c=0.29304$ 附近，它的形状和 2 轨道很像，图 5.15(b)展示了该轨道的连续形变，表 5.4 也列出了该轨道存在的 c 值范围。从这些图表中可以看到，两条轨道在 $c=0.29304$ 处发生了碰撞，在那之后就一起消失了。所以系统在 $c=0.29304$处经历了一次鞍结分岔。我们也计算了在分岔点附近的这两条轨道的雅可比矩阵，它们的本征值分别是 1.0000 和 0.999980±0.0063i 以及 1.0000 和 0.999979±0.0065i，都和 1 很接近，从而验证了我们的判断。

表 5.4　不同 c 值情况下，2 轨道的周期(左边)与它对应轨道的周期(中间和右边)

c	周期	c	周期	c	周期
0.29304	11.712672	0.29304	11.712759	0.34970	15.980388
0.30194	11.752030	0.30231	11.753695	0.35041	15.785760
0.32194	11.848710	0.31231	11.800639	0.36041	15.205865
0.35194	12.023665	0.32631	11.871753	0.37970	14.613034
0.37194	12.172040	0.33631	11.927151	0.38970	14.346235
0.38194	12.262082	0.34631	11.987297	0.39970	14.075188
0.40194	12.502820	0.35437	15.475896	0.40970	13.751299
0.41594	12.810423	0.36437	17.124491	0.41470	13.552951
0.41999	13.047633	0.37594	18.122948	0.41770	13.344453
0.42031	13.128541	0.37677	18.497761	0.42031	13.128431

我们也找到了另一条轨道，它的形状和周期在 $c=0.42031$ 附近和 2 轨道相近，见图 5.15(c)和表 5.4，在该处同样发生了一次鞍结分岔。我们计算了在分岔处这两条轨道的雅可比矩阵，它们的本征值是 1.0000 和 0.999969±0.0079i 以及 1.0000 和 0.999970±0.0078i，同样证实了鞍结分岔的发生。由对称性，我们知道 3 轨道在 $c=0.29304$ 和 $c=0.42031$ 处也发生了类似的鞍结分岔。为了更加清楚地说明系统的分岔情况，图 5.16 画出了 T_p 随 c 变化的分岔图。

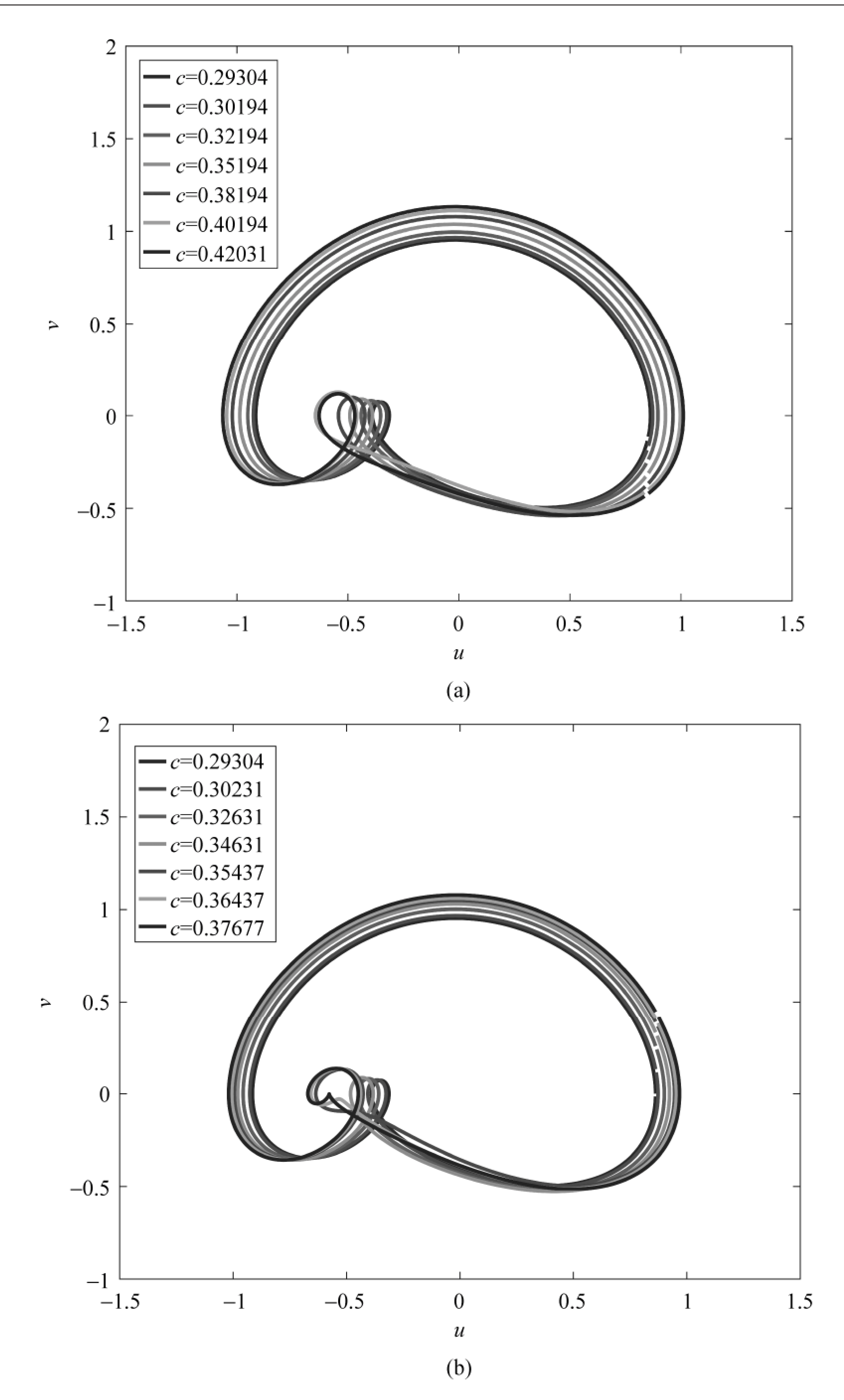
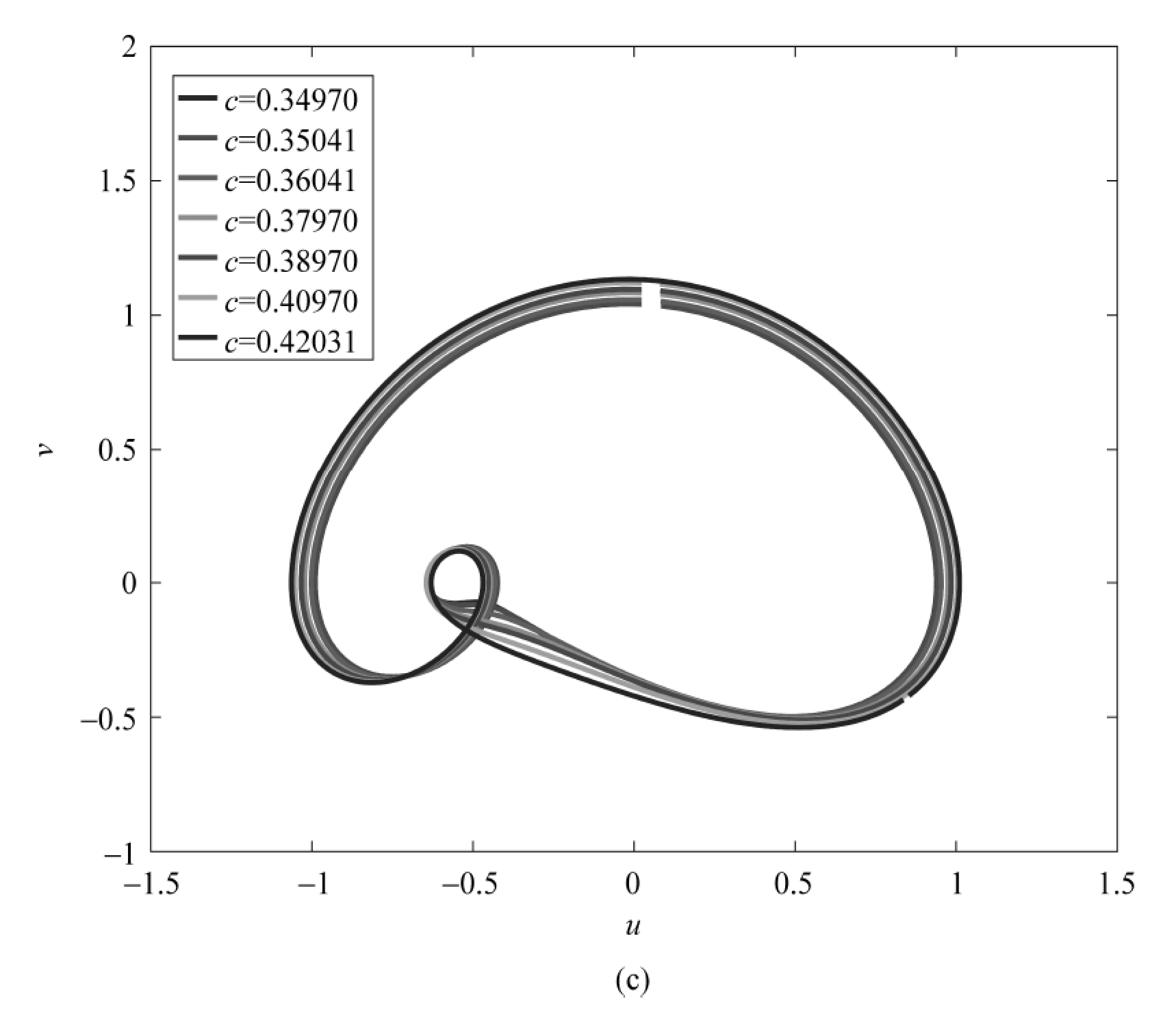


图 5.15　静态 KS 方程 2 轨道不同参数值时的连续形变图

(a) 2 轨道不同 c 值情况下的连续形变；(b)，(c) 与 2 轨道对应轨道的情况
注意到在 $c=0.29304$ 时，(a)，(b)轨道有着几乎相同的形状；而在 $c=0.42031$ 时，
(a)，(c)轨道有着几乎相同的形状
(阅读彩图请扫 158 页二维码)



(c)

图 5.15 （续）

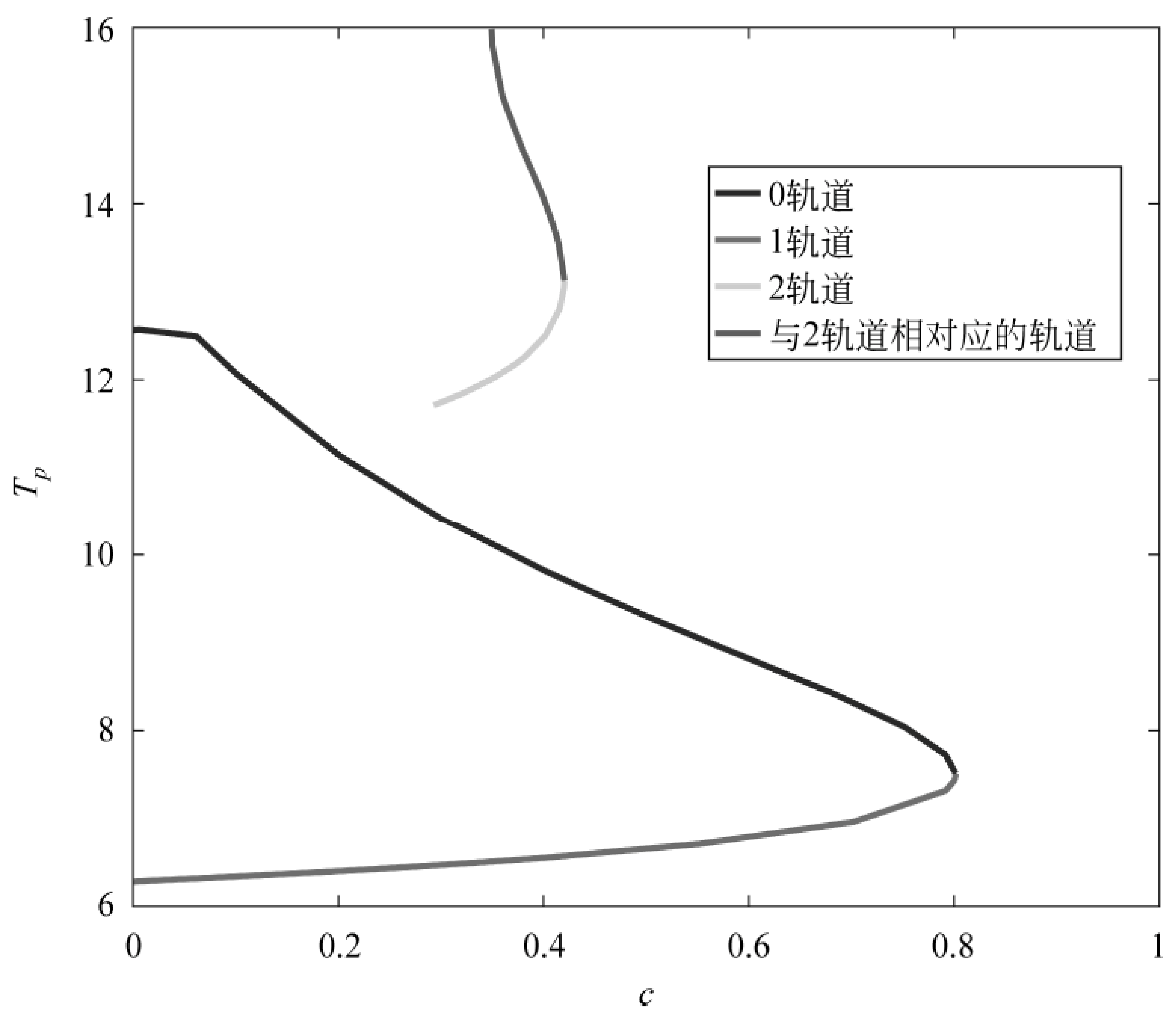


图 5.16　基本轨道的分岔图

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

通过上面的这些表格我们可以得出结论：每一类周期轨道都存在一些窗口。换句话说，当周期 T 取某些范围内的值时，一些周期轨道就不会存在。对于 1 轨道来说，它在周期 $T\in[6.28,7.5]$，$[12.56,15]$，$[18.84,22.5]$等区间存在；而对于 2 轨道来说，它则在周期 $T\in[11.71,13.12]$，$[23.42,26.24]$，$[35.13,39.36]$等区间存在。我们把这些区间画到一起，这些窗口有些类似于能带图，如图 5.17 所示。每一条轨道都对应着一列带，四条轨道就对应着 4 个带。只要周期在轨道的带内，这条周期轨道就应该存在，它对应着一个待定的 c 值。

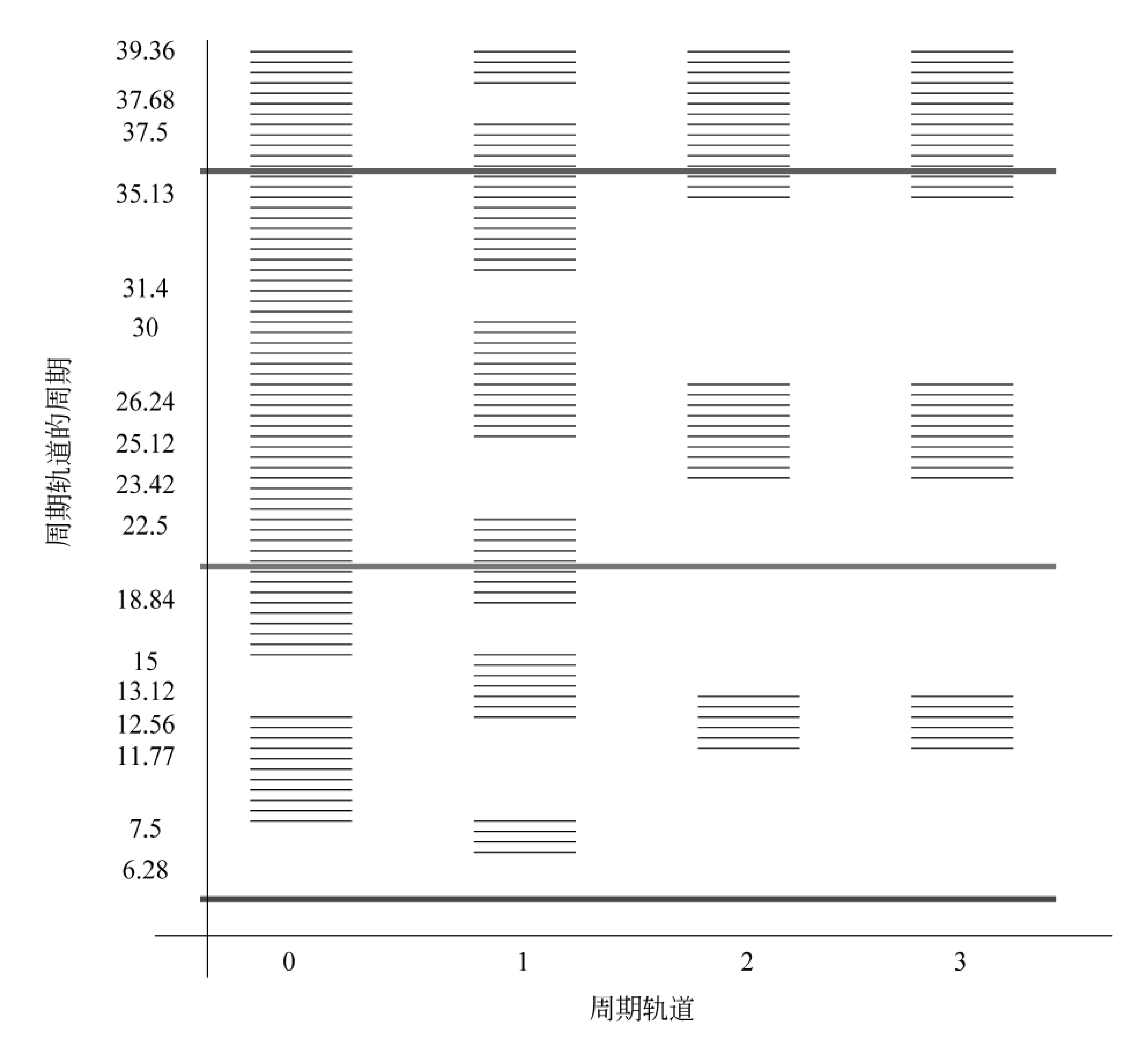


图 5.17　不同 c 值情况下四条基本轨道可能存在的周期

蓝线表示这四条基本轨道都不存在，绿线表示只有 0 轨道和 1 轨道是存在的，

红线则表示这四条基本轨道都存在

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

因此我们可以这样认为，每一条轨道都属于类似于一列带的一族。我们把这四族画在图 5.17 里，发现当 $T\in(0,6.28)$ 时(图中蓝线)，四条基本轨道都不存在。当 $T\in[18.84,22.5]$ 时(绿线)，只有 0 轨道和 1 轨道是存在的。而当 $T\in[35.13,37.5]$ 时(红线)，四种基本轨道都存在。

5.5　小结与讨论

本章系统地研究了静态 KS 方程的不稳定周期轨道。因为大多数轨道在数值积分时将逃逸，我们采用变分法来寻找周期轨道。研究了在固定系统尺度 $L=43.5$ 时动力系统重要的不动点。KS 方程的一条长轨道空间波形图的平均极大值数与基于不动点的权重计算的结果吻合得很好，这也验证了这些不动点的组织作用。当固定的积分常数取 $c=0.40194$ 时，四条简单的轨道被用作奇怪吸引子的组成单元，寻找更长的周期轨道通过对这些基本轨道的片段进行拼接来初始化，变分法可以收敛到要找的轨道上去。拓扑存在性使得我们能够建立符号动力学来分类这些周期轨道。我们也研究了所有找到的周期轨道在庞加莱截面上的二维映射，并且得到了截面上不同区域点之间跳跃以及符号序列的一些经验规律。我们还利用多尺度平均微扰方法分析了静态 KS 方程在小 c 值时相空间轨道的分布情况，由此看出系统的动力学行为极其复杂，多条异宿轨道和周期轨道同时存在。当改变 c 值时，也研究了四条基本轨道的分岔情况。我们得出结论，每一条基本轨道都对应了一组不同参数的带。如果周期处于带以外的地方，则该周期的轨道是不存在的。

拓扑的分析方法同时也为我们提供了一种暗示：如何系统地分类所有的短周期轨道以及在非线性系统的态空间里构建符号动力学。正如我们看到的那样，如果系统的耗散性不强，庞加莱截面上的回归映射很可能会相当复杂，通常来讲很难有效地建立符号动力学。利用整条轨道的拓扑性质可以表现出有趣的动力学结构，对建立符号动力学至关重要，而这单单从回归映射图里是很难直接看出来的。如何在高维态空间诸如流体系统里，成功观察到这样的规律是一个开放式的问题。正如本章介绍的那样，利用短的轨道片段来构建较长的轨道或许提供了一种方便的手段来对轨道进行编码。

在本章，我们只是粗糙的研究了不动点的组织作用。目前来说确实不像

是存在一种更清楚的方式可以用来权重不动点的重要性。为了理解整体动力学，我们需要更详细地剖析这些不动点带来的影响。从一个不动点到另一个不动点的变换经常需要周期轨道或者马鞍型的环来协调，或是通过连接轨道来协调。如何有效地在态空间里找到这些重要的低维不变结构仍然面临着挑战，第 6 章我们将讨论如何用变分法来计算静态 KS 方程复杂的连接轨道。

第 6 章　静态 Kuramoto-Sivashinsky 方程的连接轨道

第 5 章系统地研究了静态 KS 方程的不稳定周期轨道,并根据轨道的拓扑结构建立了符号动力学对全部短轨道加以归类。本章我们将要发展第 3 章介绍的用来寻找动力系统周期轨道的变分法,使之也可以用来计算静态 KS 方程具有螺旋形状复杂结构的连接轨道。与第 3 章的方式类似,首先对一条连接轨道做出合适的初始猜想,一个同伦演化方程将把这条猜想的连接轨道逐渐修正成系统真实的连接轨道。对于寻找简单结构的连接轨道,该方法的一个好处就是不需要作线性化计算。本章的最后将给出几个典型的非线性动力系统中寻找连接轨道的例子,特别要指出的是,静态 KS 方程的一些异宿轨道可以通过变分法计算出来,这些轨道显示出了有趣的拓扑结构,与第 5 章找到的该系统的不稳定周期轨道有着紧密的联系。

6.1　背 景 介 绍

动力系统中轨道结构的改变通常和连接两个不同不动点的异宿轨道的产生或消失息息相关。而同宿轨道则是一条连接同一个不动点的轨道,这样的轨道通常是在周期轨道取极限的情况下产生的,即相空间里周期轨道的周期变为无穷大。在进行分岔分析时,同宿轨道的出现通常也就标志着动力系统混沌行为的出现。研究这类轨道有许多实际的应用,例如,寻找抛物线型非线性偏微分方程行波解这个问题,就和寻找与之联系的一个常微分方程系统的异宿轨道问题是等价的[137]。而连接轨道存在的更重要的意义就在于,它是应用施尔尼科夫(Shil'nikov)定理或梅尔尼科夫(Melnikov)理论的关键[138,139]。

对于哈密顿系统来讲可以通过势函数计算出连接轨道。对于非哈密顿系统而言,要想找到这样的轨道就复杂些。最近这些年,许多研究者都对计算连接轨道感兴趣。同宿轨道可以由一系列连续的周期解来近似,这些周期解有着越来越大的周期,可以通过样分段多项式排列法计算出来。Lin 方法通过定义一个隔离了不动点的余维数 1 超平面来系统地计算连接轨道[140,141]。文献[142]和文献[143]也基于有限差分法讨论了如何计算连接轨道。在他们的计算中,最末点被放到了不动点的本征矢方向,时间归一到了[0,1]内。拜恩把异宿轨道当作是一个在近似有限域[T_-,T_+]上的边界值问题[144,145],边界条件可以通过把末点投影到不动点周围的稳定或不稳定方向上来决定。这些方法把寻找连接轨道的问题约化到了有限域内,对末点使用了线性近似。

在文献[146]里,作者提出了一种合理的谱方法,该方法不需要在有限间隔内进行截断,因此避免了要在无界域内满足边界条件的困难。尽管该方法在平滑的矢量场里很有效,但是在处理高维流问题时所涉及的计算就较为繁琐。文献[147]采用了弧长参数法,利用连接轨道的内在几何测度来避免解无界域内的边界值问题。文献[148]提出了在解低维流问题时比较有效的厄米谱方法,该方法通过解大量的代数方程来计算同宿轨道以及定义在轨道上的非线性函数。对于计算连接轨道所涉及的常微分方程边值问题,采用复杂数值计算技术的许多有效软件包可以获取[149],如常微分方程求解器 COLSYS、MatCont 以及 AUTO 的 HomCont 软件包等。

变分法通常用来数值计算哈密顿系统中的连接轨道[150]。本书第 3 章介绍了用来寻找一般流中不稳定周期轨道的变分法,其物理思想是通过初始化一个猜想圈而不是一个点。我们的算法将使成本函数朝着减小的方向演化,使得圈上每个点的切速度和矢量场的流速度都变得一致,猜想的轨道最后会收敛到系统真实的周期轨道上来。变分法的收敛速度很快且稳定性较好,寻找不稳定周期轨道很方便,特别是能够找到一些其他方法无法找到的周期轨道。我们现在的想法与之类似,尝试通过初始化一条猜想的连接轨道,然后使之逐渐演化到真实的连接轨道上来。前面介绍的初始化方式及加速手段在这里同样可以采用。但是我们面临一个问题:速度矢量在不动点附近变得极小,轨道的周期变为无穷大。显然不能像前面那样让点随时间均匀分布,

这势必会造成在不动点周围积聚大量的点，使得描述轨道的点在远离不动点处产生大的空隙，严重影响计算精度。取而代之，这里将要按照弧长来分布初始的猜想点。因此这种情况下，用来寻找周期轨道的周期性边界被具有固定值的边界所取代，在进行迭代计算时使用的矩阵变得高度带状化，这将大大提升计算速度。

已有的众多寻找连接轨道的工作，其基本思想是把连接轨道当成是有限时间域内边界值问题的解，通过附加合适的边界条件，确保轨道始于或是终止于近似的稳定或不稳定的本征空间内。这些工作都离不开对不动点周围作线性化，进而计算它的本征值和本征矢量，这会带来一定的不便。特别是在高维相空间中，不动点往往具有多个稳定和不稳定的方向。对于寻找简单的连接轨道，改进的变分法将会避免做线性化计算。更常见的是，动力系统的连接轨道在不动点周围具有螺旋形状，变分法也可以很方便地计算出这种复杂结构的轨道。尽管这时需要进行线性化计算，但即便是在高维相空间中，该方法计算鞍点间的连接轨道仍然很有效[151]。

本章的内容安排如下：在 6.2 节，为了计算静态 KS 方程的连接轨道，我们将对采用的理论方法作一介绍。通过适当修改寻找周期轨道的变分法，特别是边界条件以及初始猜想点的分布，设计出不同的方案用于计算同宿异宿轨道，我们称为弧长参数化法以及移动网格技术法。此外还将介绍如何处理边界格点以及所选取的规范条件，我们延伸该方法用来寻找具有螺旋形状的连接轨道。在 6.3 节，我们举了几个计算非线性动力系统中连接轨道的例子，成功地计算出了静态 KS 方程的连接轨道。最后在 6.4 节，我们对本章内容做了总结和讨论。

6.2 理论方法

6.2.1 方案一：弧长参数化法

首先考虑一个由常微分方程定义的流：

$$u'(t) = f(u(t)) \tag{6-1}$$

其中 $u \in R^n$，$t \in R$，如果式(6-1)存在一个解 $u(t)$，并且满足

$$u_- = \lim_{t\to-\infty} u(t), \quad u_+ = \lim_{t\to\infty} u(t), \quad f(u_\pm) = 0 \tag{6-2}$$

那么在 $u_- = u_+$ 的情况下，这条轨道称为同宿轨道；当 $u_- \neq u_+$ 时，这条轨道称为异宿轨道。本章讨论用变分法计算静态 KS 方程中这种类型的轨道。

首先回顾一下第 3 章介绍的用来寻找不稳定周期轨道的变分法。出发点是依据圈演化的基本方程：

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\tilde{\boldsymbol{v}} - \lambda \boldsymbol{v}) = -(\tilde{\boldsymbol{v}} - \lambda \boldsymbol{v}) \tag{6-3}$$

这里给定的动力系统是由 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{v}(x)$ 定义的，$\tilde{\boldsymbol{v}} = \mathrm{d}\tilde{\boldsymbol{x}}/\mathrm{d}s$ 定义了圈上一点的速度，其中 $s \in [0, 2\pi]$ 是用来参数化圈的内禀坐标。τ 是描述圈演化的虚拟时间，上式中 λ 所起的作用是调节 $\tilde{\boldsymbol{v}}$ 的大小使之与 $\boldsymbol{v}$ 相匹配。在第 3 章的计算中，沿着圈 $\lambda = \lambda(\tau)$ 是常数，但是随着时间 τ 变化。通过上面的这些定义，式(6-3)可以展开成以下形式：

$$\frac{\partial^2 \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s \partial \tau} - \lambda \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial x} \cdot \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial \tau} - \boldsymbol{v} \frac{\partial \lambda}{\partial \tau} = \lambda \boldsymbol{v} - \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s} \tag{6-4}$$

后面，我们将通过引入一个用于消除沿着圈平移不变性的规范条件来解上面这个偏微分方程。

数值计算时如果方程(6-4)像第 3 章那样离散化，当找到一条周期轨道时计算出来的点会随着时间均匀分布。在寻找同宿或异宿轨道时，因为在不动点的周围将会聚集大量的点，所以这种参数化的方式根本不起作用，我们需要修改点的分布来更加有效的表示连接轨道。

这里采用弧长来参数化圈，那么可以将圈演化方程写为

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\tilde{\boldsymbol{v}} - \lambda \frac{\boldsymbol{v}}{|\boldsymbol{v}|}\right) = -\left(\tilde{\boldsymbol{v}} - \lambda \frac{\boldsymbol{v}}{|\boldsymbol{v}|}\right) \tag{6-5}$$

我们得到

$$-\lambda\left(\frac{|\boldsymbol{v}|^2 \cdot \mathbf{1} - \boldsymbol{v}\boldsymbol{v}}{|\boldsymbol{v}|^3}\right)\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial x} \cdot \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s \partial \tau} - \frac{\boldsymbol{v}}{|\boldsymbol{v}|}\frac{\partial \lambda}{\partial \tau} = \lambda \frac{\boldsymbol{v}}{|\boldsymbol{v}|} - \tilde{\boldsymbol{v}} \tag{6-6}$$

其中 $\mathbf{1}$ 是 $d \times d$ 的单位矩阵，$\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}$ 是一个并矢符号表示 $d \times d$ 的矩阵 $\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^t$。由式(6-6)，连接轨道的弧长为

$$L = 2\pi\lambda \tag{6-7}$$

注意到如果 $|\boldsymbol{v}|$ 太小的话，式(6-6)左边的第一项会带来数值不稳定问题。这可以通过引入坐标变换来改进，我们在 6.2.2 节里详细介绍。

6.2.2　方案二：移动网格技术

这一节，我们介绍另一种重新参数化连接轨道的技术。在式(6-4)中，假定 s 仍然是和时间近似成比例的，但是 $s=s(\alpha)$ 是用新参数 α 来重新参数化的。也就是说，这里选择 $\alpha\in[0,2\pi]$作为新的参数

$$\frac{\partial}{\partial s}=\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}s}\frac{\partial}{\partial\alpha}\tag{6-8}$$

移动网格技术的关键是选取一个权重函数 $w(t)$[152]：

$$\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}t}=w(t)=\sqrt{1+C\,|\boldsymbol{v}_t|^2}\tag{6-9}$$

这里 C 是一个可调的参数。当取 $C=0$ 时则 $w(t)=1$，即恢复到了点随时间均匀分布的情形。当 $C\rightarrow\infty$时，那么 $w(t)\sim|\boldsymbol{v}|$，点就随着弧长均匀分布。如果用 α 表示弧长，我们选取

$$\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}s}\sim|\boldsymbol{v}|\tag{6-10}$$

通过采取这种参数化，式(6-4)变成

$$|\boldsymbol{v}|\frac{\partial^2\tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial\alpha\partial\tau}-\lambda\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial x}\cdot\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial\tau}-\boldsymbol{v}\frac{\partial\lambda}{\partial\tau}=\lambda\boldsymbol{v}-|\boldsymbol{v}|\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial\alpha}\tag{6-11}$$

当然，也可以根据实际需要在式(6-9)里选择其他的 C 值。从式(6-11)可以看到，6.2.1 节遇到的数值不稳定问题看起来得到了解决。

6.2.3　边界和规范条件

为了使方程的数目与未知量的数目相一致，还需要添加一个规范条件来解式(6-11)。这里，我们通过使函数式(6-12)取最小值来选取规范固定条件

$$E(\sigma)=\int_0^{2\pi}\|\boldsymbol{x}^{n+1}(s)-\boldsymbol{x}^n(s+\sigma)\|^2\mathrm{d}s\tag{6-12}$$

其中 x^n 表示 n 次迭代后圈的坐标。当 $\sigma=0$ 时，最小化条件为

$$E'(0)=0\tag{6-13}$$

这给出

$$\int_0^{2\pi}\langle\boldsymbol{x}^{n+1}(s)-\boldsymbol{x}^n(s),\boldsymbol{v}^n(s)\rangle\mathrm{d}s=0\tag{6-14}$$

即

$$\sum \delta \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{v} = 0 \tag{6-15}$$

式(6-15)的这一条件主要限制点沿着圈的横向方向移动。如果一些点必须沿着圈移动的话,那么其他的点则要朝着相反的方向移动,以保持沿着圈方向上总的移动大小是零。

当离散化一条轨道时,圈速度 $\tilde{\boldsymbol{v}}=\dfrac{\partial \tilde{\boldsymbol{x}}}{\partial s}\approx\hat{\boldsymbol{D}}\tilde{\boldsymbol{x}}$ 在不动点旁边的两个边界格点处使用三点近似,而其他的点则采用五点近似,即

$$\hat{\boldsymbol{D}} = \frac{1}{12h}\begin{pmatrix} 0 & 6 & & & & & & & \\ -8 & 0 & 8 & -1 & & & & & \\ 1 & -8 & 0 & 8 & -1 & & & & \\ & & & & \cdots & & & & \\ & & & & 1 & -8 & 0 & 8 & -1 \\ & & & & & 1 & -8 & 0 & 8 \\ & & & & & & & -6 & 0 \end{pmatrix} \tag{6-16}$$

其中 $h=2\pi/N$。这里,每一个数字代表着一个 $d\times d$ 的矩阵,空白处为零。

数值计算时,我们写成以虚拟的时间步长 $\delta\tau$ 作为迭代的欧拉步长,变分方程(6-11)离散化的迭代形式是

$$\begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{A}} & -\hat{\boldsymbol{v}} \\ \hat{\boldsymbol{a}} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \delta\tilde{\boldsymbol{x}} \\ \delta\lambda \end{pmatrix} = \delta\tau\begin{pmatrix} \lambda\hat{\boldsymbol{v}} - |\boldsymbol{v}|\hat{\tilde{\boldsymbol{v}}} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{6-17}$$

式中,$\hat{\boldsymbol{A}}=|\boldsymbol{v}|\hat{D}-\lambda\mathrm{diag}[A_1,A_2,\cdots,A_N]$,$A_{ij}=\partial v_i/\partial x_j$ 是速度的梯度场,$\hat{\boldsymbol{v}}=(v_1,v_2,\cdots,v_N)^t$,$\hat{\tilde{\boldsymbol{v}}}=(\hat{v}_1,\hat{v}_2,\cdots,\hat{v}_N)^t$ 是我们想要匹配的两个矢量场:圈速度和系统真实的流速度。$\hat{\boldsymbol{a}}$是一个 Nd 维的行矢量,它为坐标变化强加了规范条件。从式(6-17)看到,该式与第 3 章的变分计算周期轨道的表达式类似。通过迭代式(6-17)不断修正点的坐标值,使之最后收敛到想要寻找的同宿或异宿轨道上来。我们也看到由于两个渐近不动点是已知的,因此可以被移到式(6-17)的右边,这使得计算周期轨道时带状矩阵$\hat{\boldsymbol{A}}$中出现的周期项消失了。这种边界条件只是对结构简单的连接轨道适用,式(6-17)左边的矩阵可以更快地求出逆,使得计算更为有效。

我们还会面临其他一些问题。采用五点法来寻找不稳定的周期轨道，而在寻找同宿或异宿轨道时，尽管大多数的点仍然可以保持这样的精度，但由于不动点是已知的，它附近的点的计算精度就变得只有 2 阶了，如图 6.1 所示。我们可以通过在不动点附近多分布一些点来进行计算以提高精度。由式(6-9)，如果根据实际情况选取合适的 $C\in(0,\infty)$，计算时在不动点的周围将会分布更多的点。后面进行计算时，我们取 $C=5000$ 时计算出的轨道精度是令人满意的。

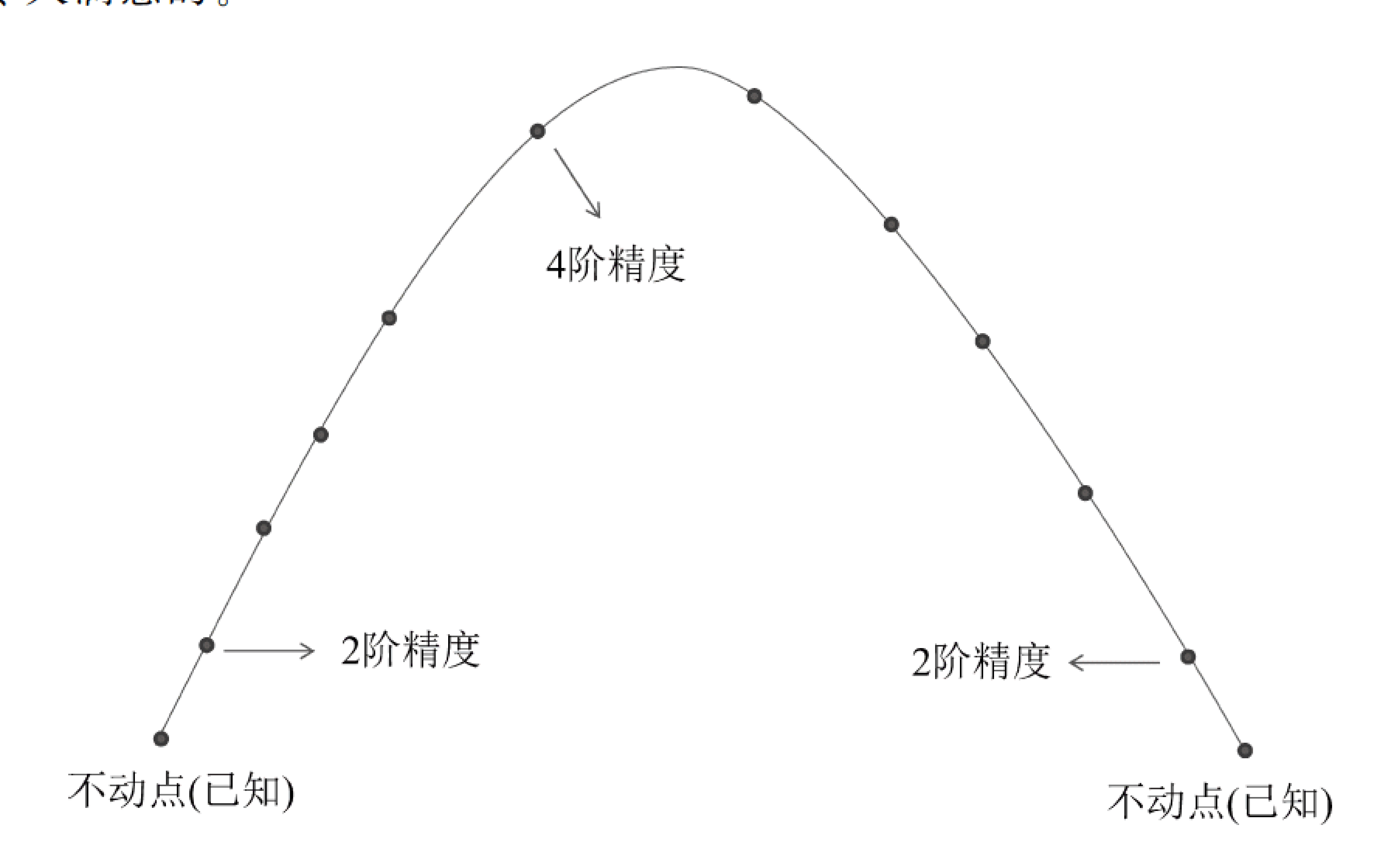


图 6.1　异宿轨道上不同位置的点有着不一样的精度

靠近不动点附近的边界点有着 2 阶计算精度，其余的点则有着 4 阶计算精度

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

6.2.4　变分法的拓展

前面介绍的方法适用于寻找具有简单结构的同宿或异宿轨道。然而在大多数的物理系统中，例如静态 KS 方程，数学上已经证明了在相当大的参数值范围内，系统存在螺旋形状的连接轨道。这种类型的轨道通常从一个不动点发出，在它的周围螺旋运动多圈，而在另一个不动点的周围也可能有类似的螺旋结构。文献[153]里用正交排列技术数值计算了螺旋形状的连接轨道，作者在著名的洛伦兹方程中找到了大量的高精度异宿轨道。这类螺旋形状的连接轨道在修正的范德波尔-杜芬电路等其他系统中也可用类似的方法

发现[154,155]。通过拓展变分法，我们同样可以计算出这种类型的连接轨道。由于这种轨道具有特殊的结构，边界条件易受到改变，因此需要在螺旋的鞍点周围进行线性化。这里不采用常用的显式或投影边界条件，而是采取逆演化来构造边界条件，这在使用变分法时很方便。

在高维情况下，对不动点进行线性化计算后会得到多个稳定和不稳定的方向，所以通常难以精确的判断某一条连接轨道是从哪个方向发出或是抵达的。为了解决这个困难，我们需要把第一个点放在不动点的附近，这里取下面的限制条件

$$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)\cdot\delta\boldsymbol{x}=0 \tag{6-18}$$

其中 $\boldsymbol{x}_0$ 是已知不动点的坐标。对于螺旋形轨道，在边界格点处的不动点不能直接用来计算圈速度，我们需要在第一个或是最后一个格点外补充构建一个额外的点。例如，可以通过如下的方式构建：沿着不稳定流形逆演化第一个格点一段时间产生出一个新点，下面是我们的处理过程。梯度矩阵 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}$可以借助于 $\boldsymbol{X}$ 对角化成对角矩阵 $\boldsymbol{B}$，它可以分解成下面的两个矩阵：

$$\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix} d_1 & & & & \\ & d_2 & & & \\ & & \vdots & & \\ & & & d_{d-1} & \\ & & & & d_d \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} d_1 & & & & & \\ & \vdots & & & & \\ & & d_k & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \vdots & \\ & & & & & 0 \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ & \vdots & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & d_{k+1} & & \\ & & & & \vdots & \\ & & & & & d_d \end{pmatrix} \tag{6-19}$$

其中 $d_1,\cdots,d_k$ 的实部都是大于零的，$d_{k+1},\cdots,d_d$ 的实部都是小于零的。也就是说 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_1+\boldsymbol{B}_2$，因此 $\boldsymbol{B}_1$ 对应着不稳定的方向，而 $\boldsymbol{B}_2$ 则对应着稳定的方向。在某些情况下，可能存在对矩阵 $\boldsymbol{B}$ 进行直接分解的方法，从而避免了特征值计算。在轨道向外螺旋的一端，$\delta\boldsymbol{x}$ 要保证在稳定方向上没有投影，虚拟

的格点可以通过下式计算出来：

$$\boldsymbol{x}(t)=\mathrm{e}^{-\boldsymbol{A}_1 t}\boldsymbol{x}=\left(1-\boldsymbol{A}_1 t+\frac{1}{2}\boldsymbol{A}_1^2 t^2-\frac{1}{6}\boldsymbol{A}_1^3 t^3+\cdots\right)\boldsymbol{x} \tag{6-20}$$

其中 $\boldsymbol{x}$ 是第一个格点的坐标，$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{X}^{-1}$ 使得轨道沿着不稳定的方向演化。在轨道螺旋向内旋进的另一端，我们对稳定方向做类似的处理。时间步长 t 可以通过第一个格点和第二个格点间的时间间隔来选取，所以实际上在每一步虚拟的格点都可精确计算并且与第一个格点是线性相关的。因此，矩阵 $\hat{\mathbf{A}}$ 仍然是没有周期项的带状矩阵。通过这种方式，我们能够计算出边界处的圈速度，然后通过迭代式(6-17)，初始猜想的连接轨道向着系统真实的连接轨道演变。

数值计算时，带状对角矩阵同样可以通过 LU 分解来求逆，这占据了较多的时间，可通过如下的迭代程序来加速：一次 LU 分解用于许多次的迭代，也就是说，用当前步的 LU 分解来近似做下一步的求逆计算，逆矩阵可以通过迭代程序精确计算得出。此外，步长也可以根据实际情况作出调整，可以在最后阶段取 $\delta\tau=1$ 恢复无阻尼牛顿法的快速收敛性。另一方面，为了得到一个具有相对低精度的解，我们最初使用少量且合理数目的点。在计算出了一条粗糙的连接轨道后，插入更多的点来构造一个修正了的轨道猜想，这往往具有很快的收敛速度。

6.3　一些例子

在本节，我们举几个用变分法计算连接轨道的例子。在下面的几个例子中，计算精度可以达到 10^{-6}。

6.3.1　洛伦兹方程

我们以洛伦兹方程为例，该方程最早是从大气热对流模型中推导出来的，方程的形式为

$$\begin{cases}\dot{x}=a(y-x)\\ \dot{y}=bx-y-xz\\ \dot{z}=-cz+xy\end{cases} \tag{6-21}$$

现在说明如何找到螺旋形状的连接轨道，该方程在 $a=10$、$b=6$ 和 $c=\frac{8}{3}$ 时存在两条结构复杂的异宿轨道[156]。对系统的动力学有一定的了解可以更好地设置初始猜想。根据数值上观察到的系统动力学，初始猜想通过如下方式获得：在不动点(0,0,0)附近取一个点，然后演化该点直到它接近焦点，以此作为初始猜想的连接轨道。在这个问题里，两个终点处的边界条件不尽相同，原点附近的情况较为简单，而在另一处则应采用螺旋结构的连接条件。由于系统的焦点是稳定的，我们在焦点附近没有进行线性化计算。图 6.2 展示了用变分法找到的两条异宿轨道，它们分别连接着原点以及两个对称的不动点，在计算时我们使用了 2000 个点。一条好的初始猜想轨道是很重要的，否则的话很可能会寻找失败。

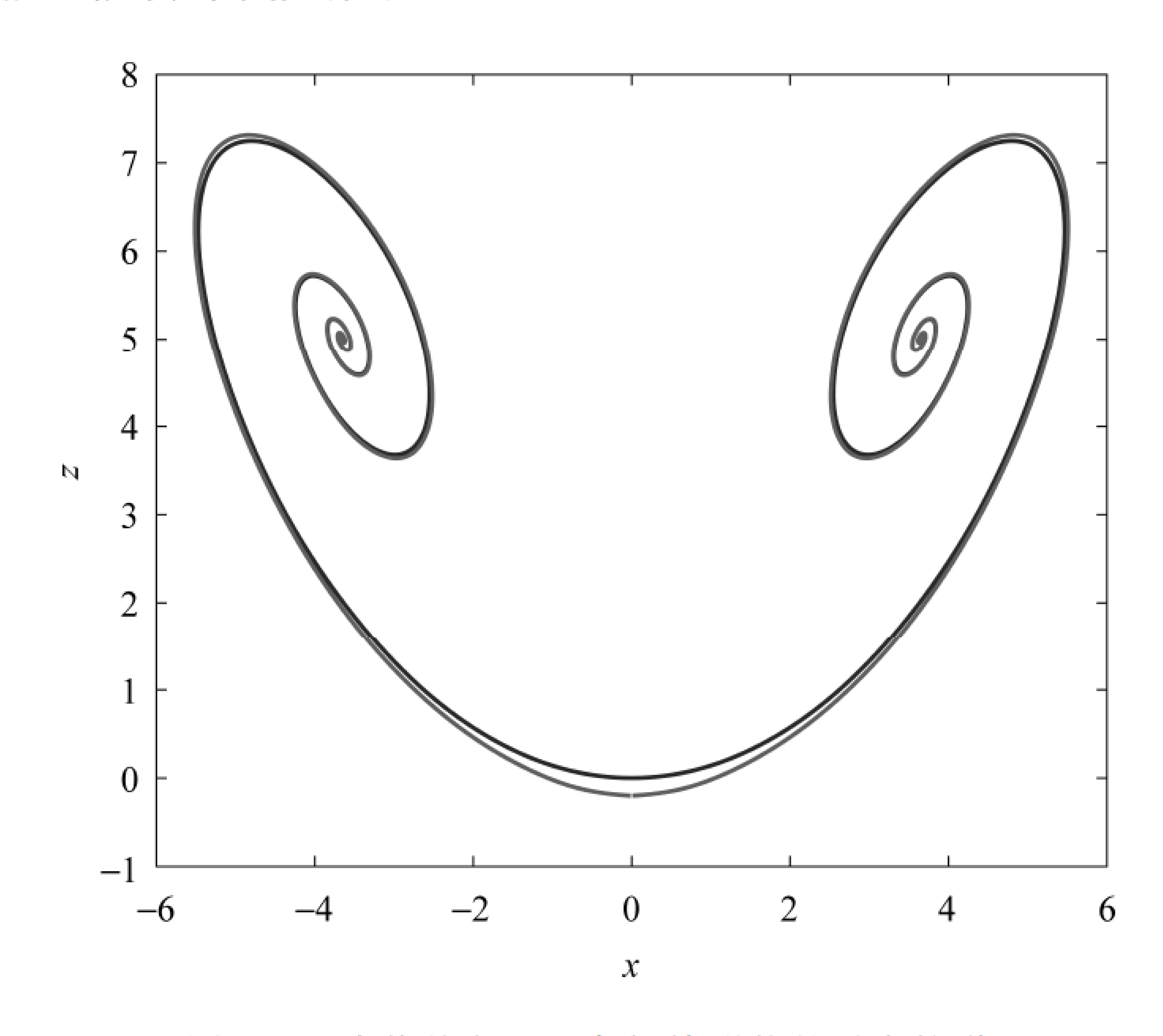


图 6.2　洛伦兹方程两条螺旋形状的异宿轨道

图中的红线是初始猜想的连接轨道，蓝线是系统真实的连接轨道

（阅读彩图请扫 158 页二维码）

6.3.2　KS 方程

本节我们举一个在高维相空间中应用变分法寻找 KS 方程连接轨道的例子。KS 方程形式如下：

$$\dot{a}_k = [(kq)^2 - \nu(kq)^4]a_k - kq \sum_{m=-\infty}^{\infty} a_m a_{k-m} \tag{6-22}$$

式中，$\nu=1$，$q=2\pi/L$。当 KS 方程的参数取 $L=22$ 时，系统存在一条异宿轨道[112]，图 6.3 展示了用变分法找到的这条异宿轨道。初始化是这样完成的：首先在距离不动点 E_0 0.01 远处的球面上沿着不稳定的本征方向选取一点，演化一段时间后获取了一部分的猜想轨道片段。对于不动点 E_1 采取类似的处理过程，使我们获取另一部分的轨道片段。最后把这两部分片段手动连接起来作为初始猜想，在计算时我们使用了 6000 个点。坐标轴 v_1、v_2 和 v_3 是由 $\mathrm{Re}\boldsymbol{e}_1$、$\mathrm{Im}\boldsymbol{e}_1$ 和 $\mathrm{Re}\boldsymbol{e}_7$ 的格拉姆-施密特(Gram-Schmidt)正交化构建的，这里 $\boldsymbol{e}_j$ 是不动点 E_0 的本征矢量。

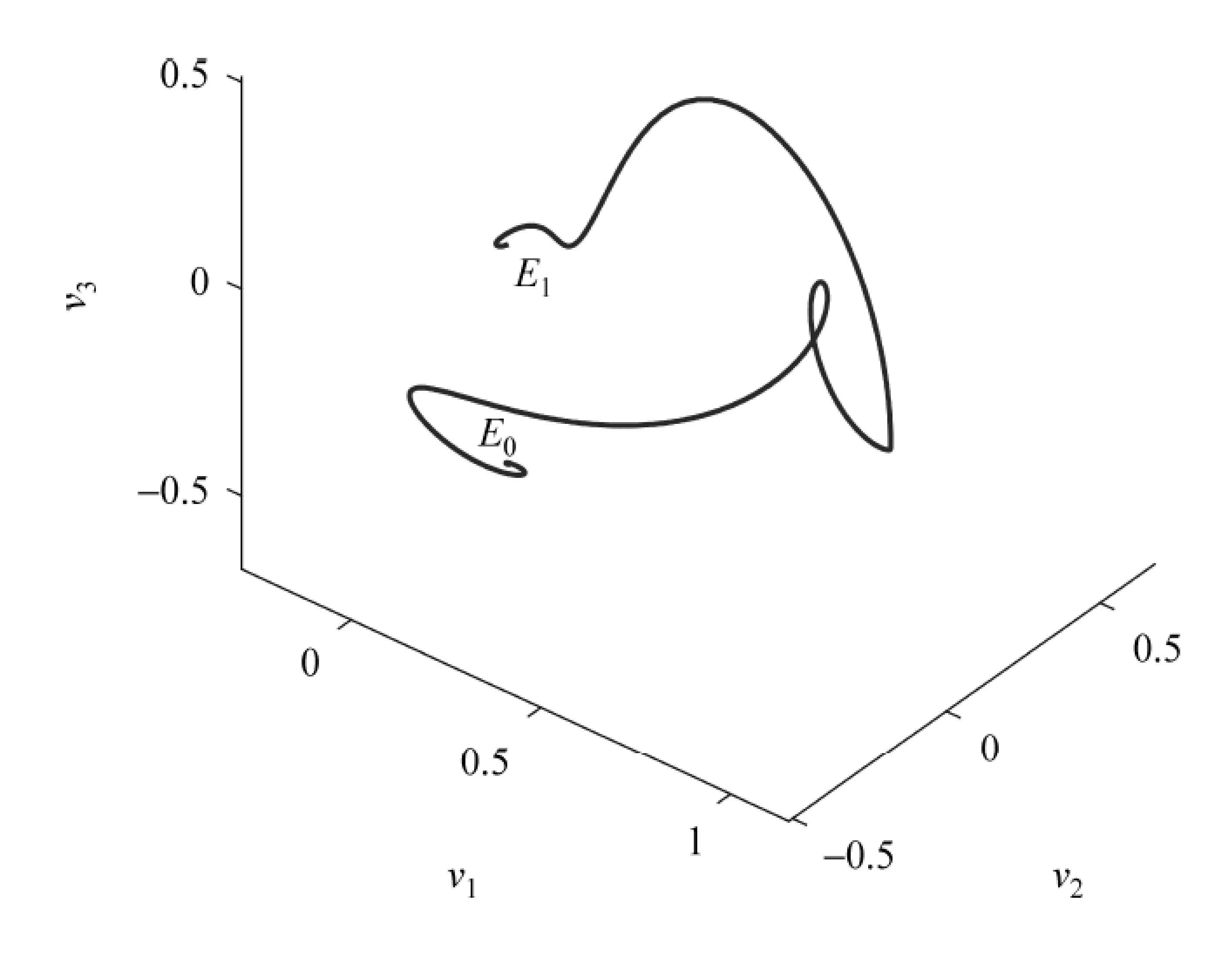


图 6.3　KS 方程的一条螺旋形异宿轨道，E_0 和 E_1 是两个不动点，128 个傅里叶模截断

(阅读彩图请扫 158 页二维码)

6.3.3　静态 KS 方程

一些动力系统中存在包含周期轨道的复杂连接轨道，现在以静态 KS 方程为例来说明寻找此类连接轨道。静态 KS 方程满足：

$$\begin{cases} \dot{u} = v \\ \dot{v} = w \\ \dot{w} = 1 - \lambda v - \dfrac{1}{2}u^2 \end{cases} \tag{6-23}$$

式中，λ 是一个参数，当 $\lambda=1$ 时，至少存在一条连接不动点 $(-\sqrt{2},0,0)$ 和 $(\sqrt{2},0,0)$ 对称的异宿轨道。应用变分法，我们找到了该系统的四条连接轨道。图 6.4 展示了这四条轨道在 uv 轴上的投影，我们在图 6.4(a)和(b)中用了 3000 个点，图 6.4(c)和(d)中用了 4000 个点。图 6.4(a)轨道的初始化是这样做的：首先在到不动点 $(\sqrt{2},0,0)$ 距离为 0.02 远处的球面上沿着不稳定的本征方向选取一点，演化一段时间后获取右半部分的猜想轨道。对于左半部分的猜想轨道，也有类似的过程。然后把左右两部分手动连接起来作为初始猜想轨道。对于图 6.4(b)和(c)的轨道，初始猜想是通过把左右这两部分的轨道和第 5 章中发现的最简单的周期轨道手动连接起来获得的。图 6.4(d)中的初始猜想轨道则是通过连接更加复杂的周期轨道构建的。

图 6.4(b)、(c)和(d)中的这几条轨道计算起来是比较困难的，部分原因是系统式(6-23)的紧致不变集是一个鞍点，所以大多数的轨道通常都会在很短的时间内逃逸到无穷远处。多点打靶法对这个系统不适用，而变分法就

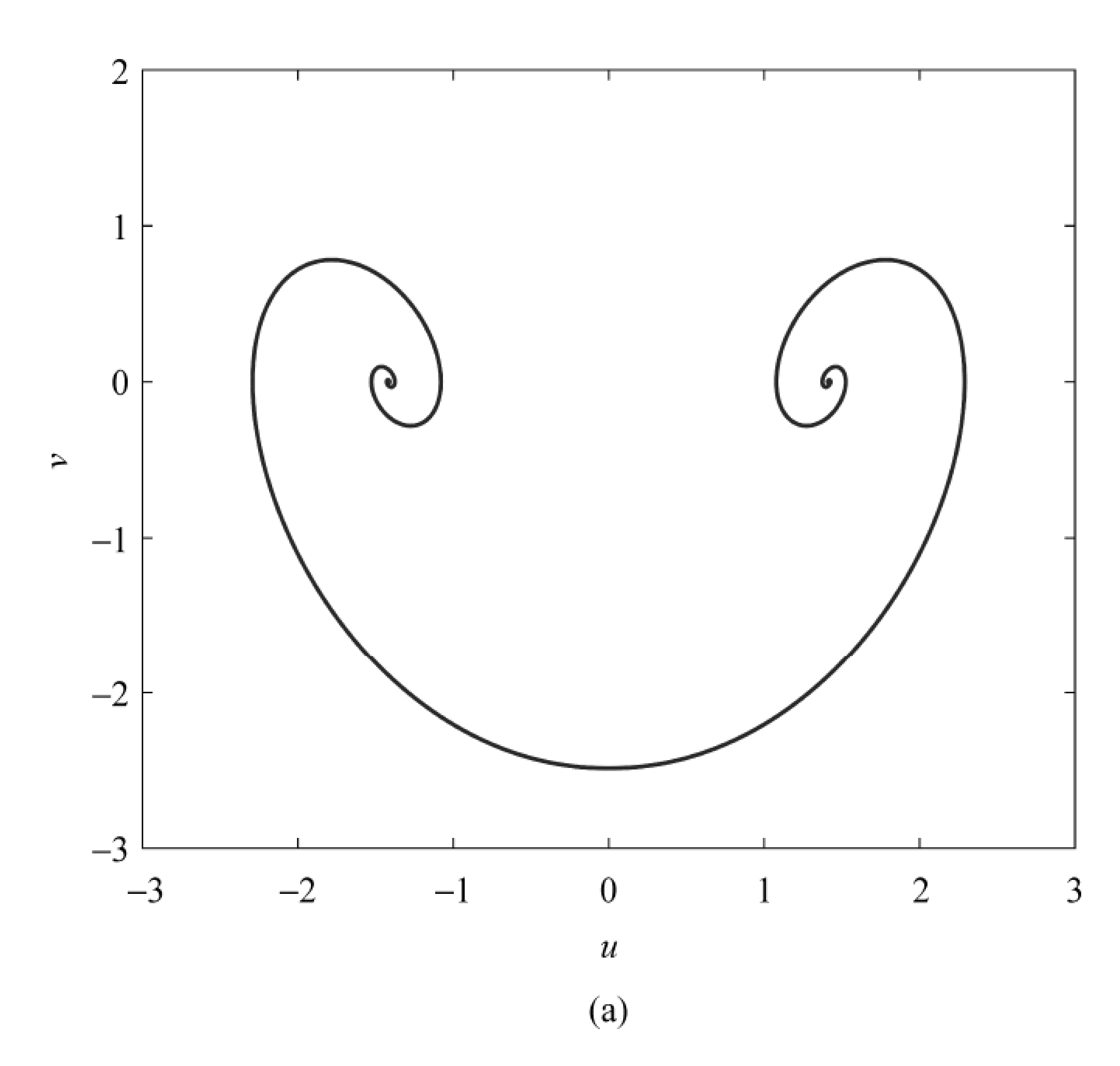
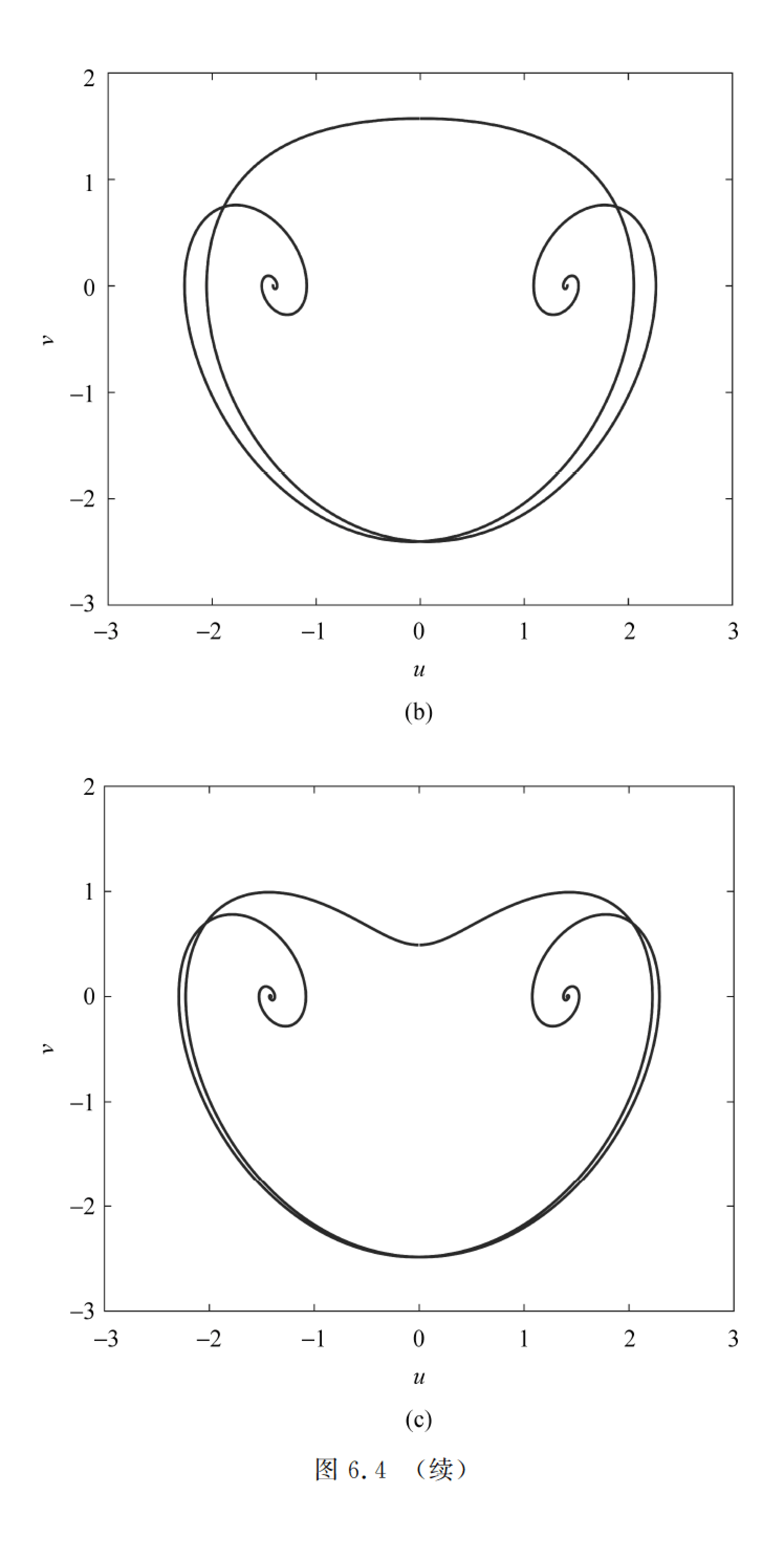


图 6.4　变分法计算出的静态 KS 方程四条对称的螺旋形连接轨道

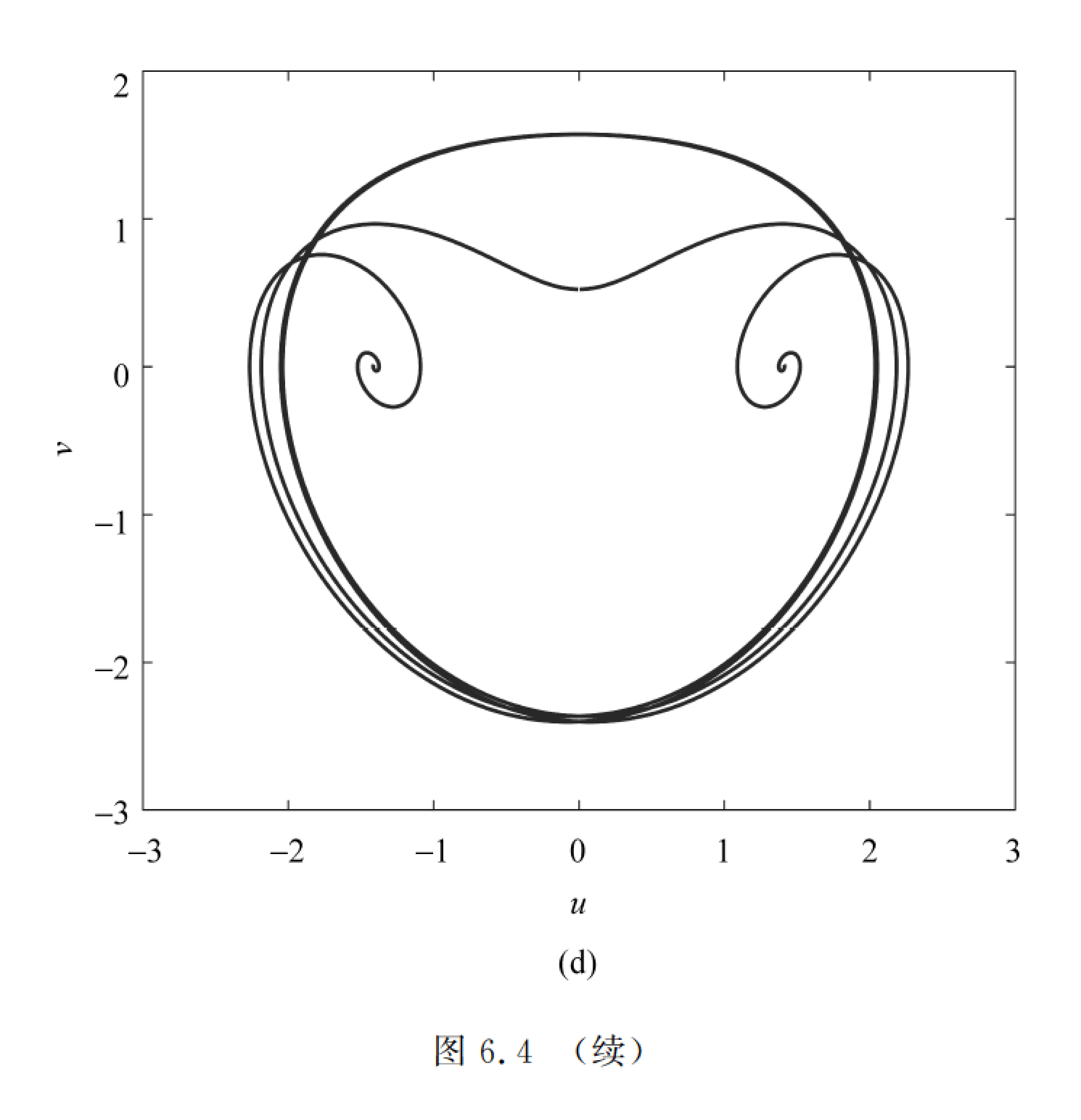
(阅读彩图请扫 158 页二维码)



(b)

(c)

图 6.4 （续）



(d)

图 6.4 （续）

显得很有效。另一方面，因为方程(6-23)是保测度的，所以存在一族异宿轨道也是可以预期的，对于 $\lambda \geqslant 0$ 系统的分岔序列是极其复杂的。第 5 章中我们介绍了可以根据周期轨道的拓扑结构对其进行分类，类似的手段在研究静态 KS 方程连接轨道时也很可能是有效的，例如我们可以根据轨道绕着两个不动点的圈数建立符号序列，以此来标定对应的连接轨道。

6.4　小结与讨论

本章通过适当修改寻找不稳定周期轨道变分法的边界条件以及点的分布，首先介绍了一种用来寻找非线性动力系统中连接轨道的理论方法。应用变分法，我们也举了寻找一些典型系统连接轨道的例子。同之前已有的方法相比，此方法在寻找简单结构的连接轨道时，不需要在不动点附近作线性化处理，从而大大方便了计算。此外，变分法也能够用来寻找具有复杂结构的螺旋形状的连接轨道。该方法与第 3 章介绍的寻找不稳定周期轨道的变分法有着密切联系。

我们看到,计算过程中遇到的数值不稳定困难通过引入坐标变换得到了解决。在寻找螺旋形的轨道时,极坐标或许可以被用来处理无穷的计算。但是它面临着三个主要问题:首先,需要在每一个焦点形的不动点周围采用极坐标,这妨碍了整体坐标的使用;其次,在极坐标下相关公式的推导也是相当繁琐的,或许也会给计算带来一定的不便;最后,在极坐标表示下,不动点变成了一条线而不再是一个点了。因此如何采取有效的变换使得计算更加精确有效仍然是一个开放式的问题。

不同不动点之间的转换对于动力系统来讲是至关重要的,也是理解许多有趣的物理及生物过程的关键所在,这一过程通常是由周期轨道或鞍点类型的环或是沿着连接轨道调节的。另一方面,连接轨道也常常存在于高维不变集中,例如周期轨道或是不变环,目前已经有一些计算二维不变环的方法[157,158]。由于变分法是很稳定的,它可以方便地用于寻找周期轨道以及不变环,在更复杂的不变集或是高维相空间中找到连接轨道同样可以实现,因此这将使我们更好地理解全局动力学。

第 7 章　总结和展望

7.1 总　　结

动力系统与湍流经过了长期的研究，目前已经发展出了多种研究方法：数值法、解析法、代数法、几何法和统计法等。更明智的选择是将上述研究方法结合到一起，周期轨道理论则很有希望结合上述方法。本书应用变分法研究了其在数学和物理问题中的应用，我们根据轨道的拓扑结构建立了合适的符号动力学，系统地分类了 KS 方程以及静态 KS 方程的不稳定周期轨道，并且介绍了一种有效计算非线性动力系统中连接轨道的理论方法，并用来实现对静态 KS 方程连接轨道的搜寻。这些结果对我们深入理解 KS 方程的混沌动力学性质具有重要意义。

第 2 章主要介绍了周期轨道理论，展示了如何在混沌系统里利用迹公式、谱行列式和动力学 ζ 函数来计算动力学的平均。计算时周期轨道展开是一个不可缺少的工具，对于应用周期轨道理论来说，找齐一定拓扑长度以内的不稳定周期轨道是至关重要的。

第 3 章指出了传统的数值方法如多点打靶法寻找不稳定周期轨道的局限性，并且详细介绍了一种用来寻找高维流中不稳定周期轨道的方法：变分法。该方法首先对想要寻找的周期轨道作出整体拓扑上的一个粗糙的圈猜想，然后让初始猜想的圈朝着真实的周期轨道逐渐演化。这种方法既保留了多点打靶法鲁棒性的特点，同时又具有非常快的收敛速度以及高稳定性，使得可以应用到诸多系统的研究中去。我们以交叉电磁场条件下的里德伯原子系统和勒斯勒方程作为实例，详细说明了如何用变分法计算周期轨道，并取得了一些有趣的结果。

第 4 章介绍了 KS 方程的不稳定周期轨道。在具有周期性边界条件的反对称子空间里，我们以两条最简单的周期轨道作为组成单元，应用变分法，在

此基础上构建寻找更长周期轨道的初始化条件。成功建立了一维符号动力学,以拓扑的方式分类系统的所有短周期轨道。

第 5 章介绍了 KS 方程的稳态解。我们首先找出了 $L=43.5$ 时 KS 方程重要的不动点,这些不动点对动力系统起到了组织作用。当固定的积分常数取 $c=0.40194$ 时,我们以静态 KS 方程四条最简单的周期轨道作为组成单元,随后建立了符号动力学,以拓扑的方式分类所有的短周期轨道。我们也适当地选取了一个庞加莱截面,得到了这些周期轨道在截面上的回归映射,从而显示出了动力系统的复杂性。最后研究了四条基本轨道的分岔情况,为在一定周期范围内寻找轨道提供了追溯的途径。该工作为如何系统分类所有的短周期轨道以及在非线性系统的态空间里构建符号动力学提供了一种新途径,并且为今后在高维态空间诸如完整的 KS 方程或者流体系统里研究周期轨道奠定了基础。

第 6 章介绍了静态 KS 方程的连接轨道,通过适当修改寻找周期轨道的变分法,使之用来寻找连接轨道。方法的优势在于:一些系统不动点的不稳定流形往往具有多个方向,很难判定轨道是沿着哪个方向出去的。用变分法计算简单形状的同宿或异宿轨道时不需要在不动点周围进行线性化,从而带来了很大的方便性,为今后寻找其他系统类似的轨道提供了一种新手段。在静态 KS 方程中,存在着结构更为复杂的连接轨道,这些轨道从一个不动点出发后在附近旋转多圈,又绕着另一个不动点旋转多圈,我们应用变分法成功地计算出了此类螺旋型的连接轨道。

7.2 展　望

变分法在数学物理问题中的应用还有很多值得关注的地方,这里我们仅基于本书已有的介绍,对今后的方向做如下展望。

如何在高维相空间里有效地分类不稳定的周期轨道是一个富有挑战性的研究方向,它与相空间的复杂结构有关。在利用周期轨道理论对轨道做展开计算时,不稳定的周期轨道必须被分类,并且以有序的方式排列,所以通常都需要建立符号动力学来描述。遗憾的是,符号动力学目前只是在处理一维或者二维映射时比较有效。我们希望能够利用不稳定的周期轨道或者连接

轨道把相空间的结构更有层次的显现出来,以便在高维相空间中也可以有效建立符号动力学。

同时在高维空间里,也一直努力研究系统地寻找不稳定周期轨道的数值算法,变分法或许正是一种很有前景的候选方法,特别是当低维的奇怪吸引子互相交织在一起时,变分法非常有效。当前我们面临着许多大自由度的非平衡、非线性复杂体系。首先,大量的自由度就需要我们使用很多变量来描述,在数值计算时需要占用大量的计算机内存,而与之相关的庞大计算常常使得速度极慢或者根本无法实现。其次,即使投入了大量的资源得到一些零散的结果,我们常常也难以发现其中蕴含的规律,得出富有洞察力的理解。因此对于高维系统甚至是流体系统来说,如何有效地简化变分算法,使计算所需的时间成本降低,这方面还需要做更多的工作。利用非线性方程的惯性流形[159,160]或许可以使我们能够摘取出高维相空间中哪些方向是最重要的,从而有效化简方程的维数,高效使用变分法计算出不稳定的周期轨道。

里德伯原子在交叉电磁场中的混沌动力学性质也一直是热点问题。该复杂系统是研究经典物理和量子物理对应的典型范例,目前体系的自电离轨迹分形结构和混沌动力学性质尚未较好解释。同时,系统巨大电偶极矩的动力学仍是一个尚未解决的物理问题。希望后续能够结合理论推导和数值计算,研究交叉场里德伯原子体系的电偶极矩性质,利用周期轨道和连接轨道来分析偶极矩变化时体系的动力学演化。此外,如何运用辛算法模拟电子的动力学行为,基于半经典闭合轨道理论研究体系的分形自相似结构,以及利用离散逃逸时间图和同宿缠绕的拓扑参量进行分析,获取混沌输运和粒子混沌逃逸的机理也是值得深入研究的。

参 考 文 献

[1] POINCARÉ J H. New methods in celestial mechanics[M]. New York: Springer-Verlag, 2007.

[2] LORENZ E N. Deterministic nonperiodic flow[J]. J. Atmos. Sci., 1963, 20(2): 130-148.

[3] SMALE S. Differentiable dynamical systems[J]. Bull. Amer. Math. Soc., 1967, 73(6): 747-817.

[4] WOLFRAM S. Cellular automata and complexity[M]. Red-wood City: Addison-Wesley, 1994.

[5] CREUTZ M. Quantum fields on the computer[M]. Singapore: World Scientific, 1992.

[6] LI T, YORKE J A. Period three implies chaos[J]. Amer. Math. Monthly, 1975, 82(10): 985-992.

[7] FEIGENBAUM M J. Quantitative universality for a class of nonlinear transformations[J]. J. Stat. Phys., 1978, 19(1): 29-52.

[8] MANDELBROT B B. The fractal geometry of nature[M]. New York: WH Freeman Co., 1982.

[9] HAO B L. Chao II[M]. Singapore: World Scientific, 1990.

[10] CVITANOVIĆ P. Universality in chaos[M]. Bristol: Adam Hilger, 1989.

[11] JEFFREYS H, JEFFREYS B. Methods of mathematical physics[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.

[12] GOLUBITSKY M, SWIFT J, KNOBLOCH E. Symmetries and pattern selection in Rayleigh-Bernard convection[J]. Physica D, 1984, 10(3): 249-276.

[13] EDWARD O. Chaos in dynamical systems[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1993.

[14] SINAI Y G. Introduction to ergodic theory[M]. Princeton: Princeton University Press, 1976.

[15] BROER H W, OSINGA H M, VEGTER G. Algorithms for computing normally hyperbolic invariant manifolds[J]. Z. Angew. Math. Phys., 1997, 48(6): 480-524.

[16] GUCKENHEIMER J, HOLMES P. Nonlinear oscillations, dynamical systems, and bifurcations of vector fields[M]. New York: Springer-Verlag, 1983.

[17] CVITANOVIĆ P. Periodic orbits as the skeleton of classical and quantum chaos[J]. Physica D, 1991, 51(1-3): 138-151.

[18] CVITANOVIĆ P, ARTUSO R, MAINIERI R, et al. Chaos: classical and quantum [M]. Copenhagen: Niels Bohr Institute, 2012.

[19] ARTUSO R, AURELL E, CVITANOVIĆ P. Recycling of strange sets: I. cycle expansions[J]. Nonlinearity, 1990, 3(1): 325-359.

[20] 吴国祯. 分子高激发振动：非线性和混沌的理论[M]. 3 版. 北京：科学出版社，2014.

[21] 杨华，韩明，孙亚威. Multipoint Shooting 方法寻找混沌系统周期轨迹[J]. 武汉大学学报(理学版)，2009，55(2)：157-161.

[22] PINGEL D, SCHMELCHER P, DIAKONOS F K. Detecting unstable periodic orbits in chaotic continuous-time dynamical systems[J]. Phys. Rev. E, 2001, 64(2): 026214.

[23] STOER J, BULIRSCH R. Introduction to numerical analysis[M]. New York: Springer-Verlag, 1983.

[24] CVITANOVIĆ P, LAN Y. In proceedings of the 10th international workshop on multiparticle production: correlations and fluctuations in QCD[M]. Singapore: World Scientific, 2003.

[25] LAN Y, CVITANOVIĆ P. Variational method for finding periodic orbits in a general flow[J]. Phys. Rev. E, 2004, 69(1): 016217.

[26] TOMAS B, Mogens H, GIOVANNI P, et al. Dynamical systems approach to turbulence[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.

[27] CHRISTIANSEN F, CVITANOVIĆ P, PUTKARADZE V. Spatiotemporal chaos in terms of unstable recurrent patterns[J]. Nonlinearity, 1997, 10(1): 55-70.

[28] GAO A, XIE J, LAN Y. Accelerating cycle expansions by dynamical conjugacy[J]. J. Stat. Phys., 2012, 246(1): 56-66.

[29] ARTUSO R, CVITANOVIĆ P, TANNER G. Cycle expansions for intermittent maps[J]. Proc. Theo. Phys. Supp., 2003, 150(1): 1-21.

[30] DETTMANN C P, CVITANOVIĆ P. Cycle expansions for intermittent diffusion [J]. Phys. Rev. E, 1997, 56(6): 6687-6692.

[31] HAO B L, ZHENG W M. Applied symbolic dynamics and chaos[M]. Singapore:

World Scientific，1998.

[32] KELLER H B. Numerical methods for two-point boundary-value problems[M]. New York：Dover，1992.

[33] MATHER J N. Variational construction of orbits of twist difeomorphisms[J]. J. Am. Math. Soc.，1991，4(2)：207-263.

[34] TOMPAIDIS S. Numerical study of invariant sets of a quasiperiodic perturbation of a symplectic map[J]. Exp. Math.，1996，5(3)：211-230.

[35] PRESS W H，FLANNERY B P，TEUKOLSKY S A，et al. Numerical recipes in C [M]. Cambridge：Cambridge University Press，1992.

[36] BARTSCH T，MAIN J，WUNNER G. Closed orbits and their bifurcations in the crossed-field hydrogen atom[J]. Phys. Rev. A，2003，67(6)：063410.

[37] AVERBUKH V，MOISEYEV N，SCHMELCHER P，et al. Transition from Rydberg to giant-dipole-moment states of hydrogen atoms in crossed fields：a suggestion for an experiment[J]. Phys. Rev. A，1999，59(5)：3695-3700.

[38] SCHMELCHER P. Giant dipole states of multielectron atoms in crossed electric and magnetic fields[J]. Phys. Rev. A，2001，64(6)：063412.

[39] DU M L，DELOS J B. Effect of closed classical orbits on quantum spectra：ionization of atoms in a magnetic field I. Physical picture and calculations[J]. Phys. Rev. A，1988，38(4)：1896-1912.

[40] Du M L，DELOS J B. The effect of closed classical orbits on quantum spectra：Ionization of atoms in a magnetic field Ⅱ. Derivation of formulas[J]. Phys. Rev. A，1988，38(4)：1913-1930.

[41] LIN S L，ZHANG Q J，ZHAO K，et al. Semiclassical calculations of recurrence spectra for lithium atoms in parallel electric and magnetic fields[J]. Chin. Phys. Lett.，2002，19(1)：29-31.

[42] WANG D H，DING S L，LIN S L. The influence of the oscillating electric field on the recurrence spectra of a Li Rydberg atom in a strong magnetic field[J]. J. Phys. B，2003，36(21)：4225-4232.

[43] LANKHUIJZEN G M，NOORDAM L D. Streak-camera probing of rubidium Rydberg wave packet decay in an electric field[J]. Phys. Rev. Lett.，1996，76(11)：1784-1787.

[44] ROBICHEAUX F，SHAW J. Calculated electron dynamics in an electric field[J]. Phys. Rev. A，1997，56(1)：278-289.

[45] MITCHELL K A, HANDLEY J P, TIGHE B, et al. Geometry and topology of escape. Ⅰ. Epistrophes[J]. Chaos, 2003, 13(3): 880-891.
[46] MITCHELL K A, HANDLEY J P, DELOS J B. Geometry and topology of escape. Ⅱ. Homotopic lobe dynamics[J]. Chaos, 2003, 13(3): 892-902.
[47] MITCHELL K A, HANDLEY J P, TIGHE B, et al. Analysis of chaos-induced pulse trains in the ionization of hydrogen[J]. Phys. Rev. A, 2004, 70(4): 043407.
[48] MITCHELL K A, HANDLEY J P, TIGHE B, et al. Chaos-induced pulse trains in the ionization of hydrogen[J]. Phys. Rev. Lett., 2004, 92(7): 073001.
[49] MITCHELL K A, STECK D A. Fractal templates in the escape dynamics of trapped ultracold atoms[J]. Phys. Rev. A, 2007, 76(3): 031403(R).
[50] TOPCU T, ROBICHEAUX F. Ionization of an highly excited hydrogen atom in parallel electric and magnetic fields[J]. J. Phys. B, 2007, 40(10): 1925-1949.
[51] WANG D H, HUANG K Y, ZHOU H, et al. The influence of a parallel magnetic field on the ionization of a hydrogen atom in an electric field[J]. J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 2009, 169(2): 86-91.
[52] ZHOU H, LI H Y, GAO C, et al. The chaotic property in the autoionization of Rydberg lithium atom[J]. Chin. Phy. B, 2008,17(12): 4428-4433.
[53] 邓善红,高嵩,李永平,等. 平行电磁场中锂原子自电离的半经典分析[J]. 物理学报, 2010, 59(2): 826-831.
[54] ZHANG H, WANG L, ZHANG L J, et al. Stark-induced L-mixing interferences in ultracold cesium Rydberg atoms[J]. Phys. Rev. A, 2013, 87(3): 33405.
[55] 段俊毅,王勇,张临杰,等. 铯 47D 精细能级超冷里德伯原子自由演化的动力学研究[J]. 物理学报, 2015, 64(2): 85-89.
[56] FLÖTHMANN E, WELGE K H. Crossed-field hydrogen atom and the three-body sun-earth-moon problem[J]. Phys. Rev. A, 1996, 54(3): 1884-1888.
[57] GEKLE S, MAIN J, BARTSCH T, et al. Extracting multidimensional phase space topology from periodic orbits[J]. Phys. Rev. Lett., 2006, 97(10): 104101.
[58] KURZ M, MATLE M, SCHMELCHER P. Ultra-long-range giant dipole molecules in crossed electric and magnetic fields[J]. Europhys. Lett., 2012,97(4): 43001.
[59] QUAN W, LIU H P, SHEN L, et al. Experimental investigation of barium spectra in crossed electric and magnetic fields[J]. Chin. Phys., 2007, 16(12): 3642-3646.
[60] SHEN L, WANG L, YANG H F, et al. Tunneling between double wells of atom

in crossed electromagnetic fields[J]. Chin. Phys. B，2009，18(12)：5277-5282.

[61] JAFFÉ C，FARRELLY D，UZER T. Transition state in atomic physics[J]. Phys. Rev. A，1999，60(5)：3833-3850.

[62] DELLNITZ M，GRUBITS K A，MARSDEN J E，et al. Set oriented computation of transport rates in 3-degree of freedom systems：the Rydberg atom in crossed fields[J]. Regul. Chaotic Dyn.，2005，10(2)：173-192.

[63] JAFFÉ C，FARRELLY D，UZER T. Transition state theory without time-reversal symmetry：chaotic ionization of the hydrogen atom[J]. Phys. Rev. Lett.，2000，84(4)：610-613.

[64] DONG C W，WANG P J，DU M L，et al. The ionized electron return phenomenon of Rydberg atom in crossed fields[J]. Mod. Phys. Lett. B，2016，30(13)：1650183.

[65] MARSAGLIA G. Choosing a point from the surface of a sphere[J]. Annals of Math. Stat.，1972，43(2)：645-646.

[66] HOGAN S D，CH S，MERKT F. Rydberg-state-enabled deceleration and trapping of cold molecules[J]. Phys. Rev. Lett.，2009，103(12)：123001.

[67] SMALE S，HiRSCH M W，DEVANEY R L. Differential equations，dynamical systems，and an introduction to chaos[M]. New York：Academic Press，2004.

[68] 陈关荣，吕金虎. Lorenz 系统族的动力学分析、控制与同步[M]. 北京：科学出版社，2003.

[69] 席德勋. 非线性物理学[M]. 南京：南京大学出版社，2000.

[70] HÉNON M. A two-dimensional mapping with a strange attractor[J]. Comm. Math. Phys.，1976，50(1)：69-77.

[71] MAY R M. Simple mathematical models with very complicated dynamics[J]. Nature，1976，261(5560)：459-467.

[72] RÖSSLER O E. An equation for continuous chaos[J]. Phys. Lett. A，1976，57(5)：397-398.

[73] AHMED E，EL-SAYED A，EL-SAKA H. On some Routh-Hurwitz conditions for fractional order differential equations and their applications in Lorenz，Rössler，Chua and Chen systems[J]. Phys. Lett. A，2006，358(1)：1-4.

[74] CHENG A L，CHEN Y Y. Analytical study of funnel type Rössler attractor[J]. Chaos，2017，27(7)：073117.

[75] GUPTA M K，YADAV C K. Jacobi stability analysis of Rössler system[J]. Int. J.

Bifurcat. Chaos，2017，27(4)：1750056.

[76] ALSTROM R B，MOREAU S，MARZOCCA P，et al. Nonlinear characterization of a Rössler system under periodic closed-loop control via time-frequency and bispectral analysis[J]. Mech. Syst. Signal Pr.，2017，99(1)：567-585.

[77] BARRIO R，BLESA F，SERRANO S. Qualitative analysis of the Rössler equations: bifurcations of limit cycles and chaotic attractors[J]. Physica D，2009，238(13)：1087-1100.

[78] MARIS D T，GOUSSIS D A. The "hidden" dynamics of the Rössler attractor[J]. Physica D，2015，295(3)：66-90.

[79] BOGDANOV Y I，BOGDANOVA N A. The study of Lorenz and Rössler strange attractors by means of quantum theory[J]. Laser Phys.，2015，25(3)：035203.

[80] LAN Y. Cycle expansions: from maps to turbulence[J]. Commun. Nonlinear Sci. and Numer. Simul.，2010，15(3)：502-526.

[81] CHARBOMMEAY P，LI Y C，PFISTER H D，et al. Cycle-expansion method for the Lyapunov exponent，susceptibility，and higher moments[J]. Phys. Rev. E，2017，96(3)：032129.

[82] SMITH P. The multiple scales method，homoclinic bifurcation and Melnikov's method for autonomous systems[J]. Int. J. Bifurcat. Chaos，1998，8(11)：2099-2105.

[83] LAN Y，CHANDRE C，CVITANOVIĆ P. Newton's descent method for the determination of invariant tori[J]. Phy. Rev. E，2006，74(4)：046206.

[84] STROGATZ S H. Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics，biology，chemistry，and engineering[M]. Boca Raton：CRC Press，2000.

[85] KHELLAT F，VASEGH N. The Kuramoto-Sivashinsky equation revisited: low-dimensional corresponding systems[J]. Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.，2014，19(9)：3011-3022.

[86] DING X，CHATÉ H，CVITANOVIĆ P，et al. Estimating the dimension of an inertial manifold from unstable periodic orbits[J]. Phy. Rev. Lett.，2016，117(2)：024101.

[87] REMPEL E L，CHIAN A C，MACAO E E，et al. Analysis of chaotic saddles in high-dimensional dynamical systems: the Kuramoto-Sivashinsky equation[J]. Chaos，2004，14(3)：545-556.

[88] NICKEL J. Travelling wave solutions to the Kuramoto-Sivashinsky equation[J].

Chaos Soliton Fract.，2007，33(4)：1376-1382.

[89] GALAKTIONOV V A，MITIDIERI E，POHOZAEV S I. Existence and nonexistence of a global solution to the Kuramoto-Sivashinsky equation[J]. Dokl. Math.，2008，77(2)：238-242.

[90] BUDANUR N B，CVITANOVIĆ P. Unstable manifolds of relative periodic orbits in the symmetry-reduced state space of the Kuramoto-Sivashinsky system[J]. J. Stat. Phys.，2017，167(3-4)：636-655.

[91] KASHCHENKO S. Bifurcations in Kuramoto-Sivashinsky equations[J]. Theor. Math. Phys.，2017，192 (1)：958-973.

[92] ONG K W. Dynamic transitions of generalized Kuramoto-Sivashinsky equation[J]. Discrete Cont. Dyn. -B，2017，21(4)：1225-1236.

[93] SAIKI Y，YAMADA M，CHIAN A C，et al. Reconstruction of chaotic saddles by classification of unstable periodic orbits：Kuramoto-Sivashinsky equation [J]. Chaos，2015，25(10)：103123.

[94] DONG C，LAN Y. Organization of spatially periodic solutions of the steady Kuramoto-Sivashinsky equation[J]. Commum. Nonlinear Sci. Numer. Simul.，2014，19(6)：2140-2153.

[95] 董成伟，李金哲，陈奕辰. Kuramoto-Sivashinsky 方程的稳态解研究[J]. 科学技术与工程，2017，17(23)：7-12.

[96] KURAMOTO Y，TSUZUKI T. Persistent propagation of concentration waves in dissipative media far from thermal equilibrium[J]. Progr. Theor. Phys.，1976，55(2)：365-369.

[97] SIVASHINSKY G I. Nonlinear analysis of hydrodynamical instability in laminar flames - I. Derivation of basic equations[J]. Acta Astr.，1977，4(11-12)：1207-1221.

[98] SIVASHINSKY G I，MICHELSON D M. On irregular wavy flow of a liquid film down a vertical plane[J]. Prog. Theor. Phys. Suppl.，1980，63(6)：2112-2114.

[99] BENNEY D J. Long waves on liquid films[J]. J. Math. Phys，1966，45(1-4)：150-155.

[100] COHEN B I，KROMMES J A，TANG W M，et al. Nonlinear saturation of the dissipative trapped-ion mode by mode coupling[J]. Nucl. Fusion，1972，16(6)：971-991.

[101] LA QUEY R E，MAHAJAN S M，RUTHERFORD P H，et al. Nonlinear

saturation of the trapped-ion mode[J]. Phys. Rev. Lett., 1974, 34(7): 391-394.

[102] HOOPER A P, GRIMSHAW R. Nonlinear instability at the interface between two viscous fluids[J]. Phys. Fluids, 1985, 28(1): 37-45.

[103] GOREN G, ECKMANN J P, PROCACCIA I. Scenario for the onset of spacetime chaos[J]. Phys. Rev. E, 1998, 57(4): 4106-4134.

[104] LAN Y H. Dynamical systems approach to 1-d spatiotemporal chaos: a cyclist's view[D]. Atlanta: Georgia Tech, 2004.

[105] KEVREKIDIS I G, NICOLAENKO B, SCOVEL J C. Back in the saddle again: a computer assisted study of the Kuramoto-Sivashinsky equation[J]. SIAM J. Appl. Math, 1990, 50(3): 760-790.

[106] VISWANATH D. Symbolic dynamics and periodic orbits of the Lorenz attractor [J]. Nonlinearity, 2003, 16(3): 1035-1056.

[107] BOGHOSIAN B M, BROWN A, JONAS L, et al. Unstable periodic orbits in the Lorenz attractor [J]. Philos Transact A- Math. Phys. Eng. Sci., 2011, 369(1944): 2345-2353.

[108] HAO B L. Symbolic dynamics analysis of the Lorenz equations[J]. Phys. Rev. E, 1998, 57(5): 5378-5396.

[109] ALLIGOOD K, SAUER T, YORKE J A. Chaos: an introduction to dynamical systems[M]. New York: Springer-Verlag, 1997.

[110] ZOLDI S M, GREENSIDE H S. Spatially localized unstable periodic orbits of a high dimensional chaotic system[J]. Phys. Rev. E, 1998, 57(3): R2511-R2514.

[111] LAN Y, CVITANOVIĆ P. Unstable recurrent patterns in Kuramoto-Sivashinsky dynamics[J]. Phys. Rev. E, 2008, 78(2): 026208.

[112] CVITANOVIĆ P, DAVIDCHACK R L, SIMINOS E. On the state space geometry of the Kuramoto-Sivashinsky flow in a periodic domain[J]. J. Appl. Dyn. Syst., 2010, 9(1): 1-33.

[113] GIBSON J F, HALCROW J, CVITANOVIĆ P. Equilibrium and traveling-wave solutions of plane Couette flow[J]. J. Fluid Mech., 2009, 638(638): 243-266.

[114] CHANDLER G J, KERSWELL R. Invariant recurrent solutions embedded in a turbulent two-dimensional Kolmogorov flow[J]. J. Fluid Mech., 2013, 722(5): 554-595.

[115] KREILOS T, ECKHARDT B. Periodic orbits near onset of chaos in plane Couette flow[J]. Chaos, 2012, 22(4): 047505.

[116] TROY W C. The existence of steady solutions of the Kuramoto-Sivashinsky equation[J]. J. Di . Eqn. , 1989, 82(2): 269-313.

[117] JONES J, TROY W C, MACGILLIVARY A D. Steady solutions of the Kuramoto-Sivashinsky equation for small wave speed[J]. J. Di . Eqn. , 1992, 96(1): 28-55.

[118] FRISCH U, SHE Z S, THUAL O. Viscoelastic behavior of cellular solutions to the Kuramoto-Sivashinsky model[J]. J. Fluid Mech. , 2006, 168(168): 221-240.

[119] MCCORD C K. Uniqueness of connecting orbits in the equation Y (3) = Y2 - 1 [J]. J. Math. Anal. Appl. , 1986, 114(2): 584-592.

[120] MICHELSON D. Steady solutions of the Kuramoto-Sivashinsky equation [J]. Physica D, 1986, 19(1): 89-111.

[121] HOOPER A P, GRIMSHAW R. Travelling wave solutions of the Kuramoto-Sivashinsky equation[J]. Wave Motion, 1988, 10(5): 405-420.

[122] CHANG H C. Traveling waves on fiuid interfaces: normal form analysis of the KS equation[J]. Phys. Fluids, 1986, 29(10): 3142-3147.

[123] GREENE J M, KIM J S. The steady states of the Kuramoto-Sivashinsky equation [J]. Physica D, 1988, 33(1-3): 99-120.

[124] HÉNON M. Generating families in the restricted three-body problem II. Quantitative study of bifurcations[M]. New York: Springer, 2001.

[125] BOUQUET S. Hamiltonian structure and integrability of the stationary Kuramoto-Sivashinsky equation[J]. J. Math. Phys. , 1995, 36(3): 1242-1258.

[126] NUSSE H E, YORK J A. A procedure for finding numerical trajectories on chaotic saddles[J]. Physica D, 1989, 36(1-2): 137-156.

[127] MORESCO P, DAWSON S P. The PIM-simplex method: an extension of the PIM-triple method to saddles with an arbitrary number of expanding directions[J]. Physica D, 1999, 126(1-2): 38-48.

[128] SWEET D, NUSSE H E, YORKE J A. Stagger-and-step method: detecting and computing chaotic saddles in higher dimensions[J]. Phys. Rev. Lett. , 2001, 86(11): 2261-2264.

[129] DETURCK D, GLUCK H. Electrodynamics and the Gauss linking integral on the 3-sphere and in hyperbolic 3-space[J]. J. Math. Phys. , 2008, 49(2): 222-223.

[130] MASSEY W S. Higher order linking numbers[J]. J. Knot Theor. Ramif. , 1998, 7(3): 393-414.

[131] WORCEL A, STROGATZ S, RILEY D. Structure of chromatin and the linking number of DNA[J]. P. Natl. Acad. Sci., 1981, 78(3): 1461-1465.

[132] ARMBUSTER D, GUCKENHEIMER J, HOLMES P. Kuramoto-Sivashinsky dynamics on the center-unstable manifold[J]. SIAM J. Appl. Math., 1989, 49(3): 676-691.

[133] HOLMES P, LUMLEY J L, BERKOOZ G. Turbulence, coherent structures, dynamical systems and symmetry[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.

[134] HYMAN J M, NICOLAENKO B. The Kuramoto-Sivashinsky equation: a bridge between PDE's and dynamical systems[J]. Physica D, 1986, 18(1): 113-126.

[135] KENT P, ELGIN J. Travelling waves of the Kuramoto-Sivashinsky equation: Period-multiplying bifurcations[J]. Nonlinearity, 1992, 5(4): 899-919.

[136] LAU Y T. The "cocoon" bifurcations in three-dimensional systems with two fixed points[J]. Int. J. Bifur. Chaos, 1992, 2(3): 543-558.

[137] FIFE P C. Mathematical aspects of reacting and diffusing systems[M]. New York: Springer-Verlag, 1979.

[138] SILVA C P. Shilnikov's theorem — a tutorial[J]. IEEE Trans. Circ. Syst., 1993, 40(10): 675-682.

[139] SHILNIKOV L P. A contribution of the problem of the structure of an extended neighborhood of rough equilibrium state of saddlefocus type [J]. Sbornik: Mathematics, 1970, 10(1): 91-102.

[140] KRAUSKOPF B, RIEß T. A Lin's method approach to finding and continuing heteroclinic connections involving periodic orbits[J]. Nonlinearity, 2008, 21(8): 1655-1690.

[141] OLDEMAN B E, CHAMPNEYS A R, KRAUSKOPF B. Homoclinic branch switching: a numerical implementation of Lin's method[J]. Int. J. Bifurc. Chaos Appl. Sci. Eng., 2003, 13(10): 2977-2999.

[142] DOEDEL E J, FRIEDMAN M J. Numerical computation of heteroclinic orbits[J]. J. Comput. Appl. Math., 1989, 26(1): 155-170.

[143] FRIEDMAN M J, DOEDEL E J. Numerical computation and continuation of invariant manifolds connecting fixed points[J]. SIAM J. Numer. Anal., 1991, 28(3): 789-808.

[144] BEYN W J. Global bifurcations and their numerical computation[M]. Berlin:

Springer Netherlands，1990.

[145] BEYN W J. The numerical computation of connecting orbits in dynamical systems [J]. IMA J. Numer. Anal.，1990，10(3)：379-405.

[146] LIU Y，LIU L，TANG T. The numerical computation of connecting orbits in dynamical systems：a rational spectral approach[J]. J. Comput. Phys.，1994，111(2)：373-380.

[147] LIU L，MOORE G，RUSSELL R. Computation and continuation of homoclinic and heteroclinic orbits with arclength parameterization[J]. SIAM J. Sci. Comp.，1997，18(1)：69-93.

[148] KOROSTYSHEVSKIY V R，WANNER T A. Hermite spectral method for the computation of homoclinic orbits and associated functionals[J]. J. Comput. Appl. Math.，2007，206(2)：986-1006.

[149] BADER G，ASCHER U. A new basis implementation for a mixed order boundary value ODE solver[J]. SIAM J. Sci. Stat. Comput.，1987，8(8)：483-500.

[150] MATHER J N. Variational construction of connecting orbits[J]. Annales de l'institut Fourier，1993，43(5)：1349-1386.

[151] DONG C，LAN Y. A variational approach to connecting orbits in nonlinear dynamical systems[J]. Phys. Lett. A，2014，378(9)：705-712.

[152] ZHOU X，REN W，WEINAN E. Adaptive minimum action method for the study of rare events[J]. J. Chem Phys.，2008，128(10)：104111.

[153] DOEDEL E J，KRAUSKOPF B，OSINGA H. Global bifurcations of the Lorenz manifold[J]. Nonlinearity，2006，19(12)：2947-2972.

[154] KRANSKOPF B，OSINGA H，GALAN J. Numerical continuation methods for dynamical systems：path following and boundary value problems[M]. New York：Springer-Verlag，2007.

[155] OLDEMAN B，CHAMPNEYS A，KRAUSKOPF B. Homoclinic branch switching：a numerical implementation of Lin's method[J]. Int. J. Bifur. Chaos，2003，13(10)：2977-2999.

[156] SPARROW C. The Lorenz equations：bifurcations，chaos，and strange attractors [M]. New York：Springer-Verlag，1982.

[157] DÍEZ C，JORBA À，SIMÓ C. A dynamical equivalent to the equilateral libration points of the earth-moon system[J]. Celest. Mech. Dyn. Astron.，1991，50(1)：13-29.

[158] JORBA À，OLMEDO E. On the computation of reducible invariant tori on a parallel computer[J]. SIAM J. Appl. Dyn. Syst. ,2009，8(4)：1382-1404.

[159] FOIAS C，SELL G R，TEMAM R. Inertial manifolds for nonlinear evolutionary equations[J]. J. Differ. Equations，1988，73(2)：309-353.

[160] BROOMHEAD D S，KIRBY M. A new approach to dimensionality reduction：theory and algorithms[J]. SIAM J. Appl. Math. ，2000，60(6)：2114-2142.

全书彩图二维码

